

DOPAGE, TEMPÉRATURE CRITIQUE ET ÉTUDE DU MODÈLE DE HUBBARD À TROIS BANDES

par

NICOLAS KOWALSKI

Mémoire présenté au département de physique
en vue de l'obtention du grade de maître ès sciences (M.Sc.)

Faculté des Sciences

Université de Sherbrooke

Sherbrooke, Québec, Canada – 10 juin 2021

Le 10 juin 2021

le jury a accepté le mémoire de Monsieur Nicolas KOWALSKI dans sa version finale

Membres du jury

Professeur André-Marie Tremblay
Directeur de recherche
Département de physique

Professeur Ion Garate
Membre Interne
Département de physique

Professeur David Sénéchal
Président rapporteur
Département de physique

Résumé

Découverte il y a 35 ans, la supraconductivité dans les cuprates fait, aujourd'hui encore, tourner toutes les têtes. Qu'il s'agisse d'augmenter leur température critique ou bien de comprendre les phénomènes en œuvre dans ces matériaux, ils sont au centre de l'attention d'un large pan de la communauté de la physique de la matière condensée. D'un point de vue théorique, le modèle de Hubbard accompagné de la théorie de champ moyen dynamique sur amas (CDMFT) reproduit une grande partie des observations expérimentales. Il permet bien de décrire l'isolant de Mott ainsi que son comportement quand il est dopé. Cependant, il n'a pas été en mesure d'expliquer une observation faite très rapidement après la découverte de ces matériaux et qui montrait une corrélation entre la température critique et la distribution des trous dans la couche d'oxyde de cuivre [1, 2]. Ensuite, les composés parents des cuprates étant des isolants de transfert de charge [3] (et non strictement des isolants de Mott), le modèle de Hubbard ne suffit pas à les décrire. Le modèle de Hubbard à trois bandes (ou modèle d'Emery-VSA) permet, lui, d'inclure explicitement les orbitales d'oxygène et ainsi d'étudier leur rôle dans le phénomène supraconducteur.

Dans ce mémoire, je présente une étude de ce modèle en utilisant la CDMFT ainsi qu'un solveur d'impureté CT-QMC (CT-HYB) pour accéder aux propriétés du système à température non nulle. J'observe alors une corrélation, à la fois entre la température critique, le dopage en trous sur les sites d'oxygène et le gap de transfert de charge. Cela correspond aux résultats expérimentaux. Je trouve cependant que cette corrélation n'est pas totale et ne permet pas de prédire la température critique d'un système.

Je m'intéresse ensuite au comportement d'autres observables lorsque l'on varie les paramètres du modèle. J'identifie alors une transition du premier ordre au sein même de la phase supraconductrice. Cette transition de premier ordre était déjà observée dans le modèle à une bande dans la phase normale et dans le modèle à trois bandes dans la phase supraconductrice. Je la décris plus en détail et m'intéresse aux conditions de son apparition. Enfin, je regarde l'effet de la phase antiferromagnétique sur la phase supraconductrice et conclus que l'étude de la supraconductivité dans les cuprates nécessite de plus basses températures que celles atteignables aujourd'hui.

Remerciements

Je commence cette partie par remercier mon directeur de recherche, le professeur André-Marie S.¹ Tremblay. Il m'a accueilli pour un stage au courant de l'année 2019 et m'a tout de suite fait sentir chez moi, pourtant si loin de ma France natale. Je suis resté un an et demi de plus que prévu finalement. Que ce soit autour d'un plat de Tortitos chez lui, près du lac Magog ou bien dans son bureau pour discuter de sujets plus sérieux, il a toujours su m'inspirer et me conseiller. Je te remercie donc pour toutes les discussions que nous avons eues, à propos de physique, de ma vie future ou même de ton passé, riche en anecdotes et expériences extraordinaires. J'ai très envie de refaire du patin ensemble si ton dos le permet, quand je repasserai autour de Sherbrooke.

Ensuite, je veux remercier les collègues de bureau et amis qui ont ensoleillé mon court séjour québécois, Chloé et Pierre-Olivier d'abord puis Olivier, Vivien, Jay et encore Marc-Antoine, Benjamin et Nikita. Autour d'une bière, d'une bonne chanson, d'un jeu, de restes de sucreries d'Halloween d'André-Marie ou même de sujets de physique, vous avez été très importants pour moi pendant ces deux belles années.

Enfin, je veux remercier Sid, avec qui j'ai eu l'occasion de collaborer sur un article pendant près de la moitié de la maîtrise. Merci beaucoup pour toutes les discussions qu'on a pu avoir, à propos du mécanisme supraconducteur ou bien de la position de la petite flèche de la figure 3.

1. ? On ose jamais redemander le nom d'une personne qu'on connaît depuis un certain temps.

Table des matières

Résumé	1
Remerciements	2
Introduction	8
1 Supraconductivité dans les cuprates	9
1.1 Motivations	9
1.1.1 Introduction au diagramme de phase	9
1.1.2 Le plan d'oxyde de cuivre	10
1.1.3 Résultats expérimentaux	11
1.2 Modélisation des cuprates	13
1.2.1 Considérations physiques	13
1.2.2 Les équations	15
1.2.3 Choix des paramètres	17
1.3 Étude préliminaire du modèle	18
1.3.1 Intuitions	18
1.3.2 Résolution sans interactions et gap de transfert de charge	18
2 Les méthodes	22
2.1 Une introduction à la DMFT	23
2.1.1 Le modèle d'impureté d'Anderson	23
2.1.2 Les équations d'autocohérence	29
2.1.3 Le cycle de DMFT	30
2.2 Le programme CT-Seg-3B	31
2.2.1 Introduction aux amas	31
2.2.2 La représentation segment	34
2.2.3 Fonctionnement de la simulation Monte-Carlo	36
2.3 Phases et paramètres d'ordre	41
2.3.1 Partie normale	42
2.3.2 Partie anormale	44
3 Résultats	45
3.1 Paramètre d'ordre	47
3.1.1 Occupation totale et introduction aux graphes	47
3.1.2 Dopages sur les sites atomiques	53
3.1.3 Gap de transfert de charge	57
3.2 Température critique	61

3.2.1	Disparition du paramètre d'ordre	61
3.2.2	Correction avec la rigidité superfluide	62
3.3	Occupations et potentiel chimique	65
3.3.1	Occupations sur les sites atomiques	65
3.3.2	Relations au potentiel chimique	68
3.4	Régime d'hystérèse	72
3.4.1	Occupation et discontinuité	72
3.4.2	Retour aux dômes	76
3.4.3	Occupation sur les sites atomiques	77
3.5	Autres observables	80
3.6	Phase antiferromagnétique	86
3.6.1	Point de départ	87
3.6.2	Régime d'hystérèse	90
Conclusion		91
4 Annexes		93
4.1	Modification du programme CT-Seg-3B	93
4.1.1	L'erreur	93
4.1.2	Introduction de t'_{pp}	102
4.2	L'Hamiltonien en représentation de Nambu	106
4.3	Calcul de la rigidité superfluide	108
4.3.1	Substitutions de Peierls	108
4.3.2	Formule de la rigidité superfluide	109
4.3.3	Correction de la vitesse	111
4.4	Optimisation du cycle Monte-Carlo	114
4.5	Pseudogap	119

Table des figures

1.1	Structure et diagramme de phase des cuprates	10
1.2	Diagramme de phase des cuprates en 3 dimensions	12
1.3	Illustrations du Hamiltonien et de l'amas CDMFT	15
1.4	Densité d'états sans interactions au point de départ de l'étude du modèle à trois bandes	19
1.5	Structure de bande sans interactions du modèle de Hubbard à trois bandes . .	21
2.1	Illustration de la forme des orbitals atomiques s et d	33
2.2	Illustration de la représentation segment du solveur CT-HYB	36
2.3	Illustration de la localité des pas dans une simulation Monte-Carlo	39
3.1	Expérience originale de H. Kamerlingh Onnes mesurant la résistivité du mercure en fonction de la température	46
3.2	Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage en trous total pour $\epsilon_p \leq 9$	48
3.3	Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage en trous total pour $\epsilon_p \geq 9$	50
3.4	Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage en trous total pour plusieurs ensembles de paramètres	51
3.5	Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage en trous total des deux côtés du demi-remplissage	52
3.6	Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage en trous sur les sites d'oxygène pour $\epsilon_p \leq 9$	54
3.7	Paramètre d'ordre supraconducteur en fonction du dopage en trous sur les sites d'oxygène pour une variation de tous les paramètres	55
3.8	Représentation résumée de la corrélation entre occupation sur les sites d'oxygène et paramètre d'ordre	56
3.9	Densités d'états sans interactions pour plusieurs ensembles de paramètres . . .	59
3.10	Densité d'états au demi-remplissage et gap de transfert de charge	60
3.11	Comparaison expérience-théorie des graphes 3D représentant la température critique en fonction des dopages sur les sites atomiques	62
3.12	Comparaison entre les températures critiques KT et CDMFT	65
3.13	Illustration du critère utilisé pour déterminer une borne inférieure à T_C^{KT} . . .	66
3.14	T_C^{KT} et borne inférieure en fonction du dopage en trous sur les sites d'oxygène .	67
3.15	Dopage en trous sur les sites de cuivre en fonction du dopage en trous sur les sites d'oxygène dans le régime du dôme supraconducteur	68
3.16	Occupation totale n_{tot} en fonction du potentiel chimique μ et $\frac{\partial n_{tot}}{\partial \mu}$ en fonction de l'occupation totale	69

3.17	Occupation totale en fonction du potentiel chimique dans l'état supraconducteur et dans l'état normal	71
3.18	Occupation totale en fonction du potentiel chimique dans le régime d'hysteresis	73
3.19	Occupation totale en fonction du potentiel chimique, comparaisons entre les différents régimes	73
3.20	$\frac{\partial n_{tot}}{\partial \mu}$ en fonction de l'occupation pour un changement de t'_{pp}	75
3.21	Dômes supraconducteurs dans le régime d'hysteresis	76
3.22	Dopages sur les sites atomiques, comparaison entre les régimes	78
3.23	Illustration de l'effet du gap de transfert de charge sur les relations entre les dopages	79
3.24	Doubles occupations	80
3.25	Paramètre d'ordre maximal en fonction des susceptibilités de spin.	82
3.26	Facteur de Stoner dans l'état normal	85
3.27	Symétries du vecteur propre associé au facteur de Stoner	85
3.28	Occupation totale en fonction du potentiel chimique dans le régime antiferromagnétique	87
3.29	Paramètres d'ordre en fonction du dopage total en trous	88
3.30	Illustration de l'influence de la phase antiferromagnétique sur la phase supraconductrice	89
4.1	Illustration de la procédure de binning	97
4.2	Répartition des termes de R_k dans R_{k+1} dans la procédure de binning	99
4.3	Exemple de courbe de binning	101
4.4	Étude numérique de la simulation Monte-Carlo et du cycle d'autocohérence	115
4.5	Précision de la self-énergie en fonction du nombre d'itérations utilisées pour la moyenne	116
4.6	Convergence difficile d'une observable proche d'une transition de phase	117
4.7	Pseudogap dans l'état normal et hystérèse	120
4.8	Densité d'états totale proche de $\omega = 0$ dans l'état supraconducteur	121
4.9	Densité d'états totale proche de $\omega = 0$ dans l'état supraconducteur dans le régime d'hystérèse	123

Acronymes

T_C Température critique supraconductrice.

ALPS *Algorithms and Libraries for Physics Simulations*.

BCS Bardeen, Cooper, Schrieffer. Noms des auteurs de la théorie éponyme.

CDMFT *Cluster Dynamical Mean Field Theory* : Théorie de champ moyen dynamique sur amas.

CT-AUX Développement en champ auxiliaire du CT-QMC.

CT-HYB Développement en hybridation du CT-QMC.

CT-INT Développement en interaction du CT-QMC.

CT-QMC *Continuous Time Quantum Monte-Carlo* : Monte-Carlo quantique à temps continu.

DFT *Density functional theory* : Théorie de la fonctionnelle de la densité.

DMFT *Dynamical Mean Field Theory* : Théorie de champ moyen dynamique.

DOS *Density of states* : Densité d'états.

KT Kosterlitz Thouless.

LSCO $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$, première famille de matériaux supraconducteurs à haute température critique. Ils sont très étudiés encore aujourd'hui.

RMN Résonance magnétique nucléaire.

Introduction

La supraconductivité a été découverte en 1911 [4] par hasard par le physicien Heike Kamerlingh Onnes, alors qu'il étudiait les propriétés du mercure à très basse température (4.2 Kelvins). Il reçut le prix Nobel de physique en 1913, non pas pour sa découverte des supraconducteurs, mais pour ses travaux sur les propriétés de la matière à très basse température qui menèrent entre autres à la production d'hélium liquide. Ce phénomène est le plus souvent caractérisé par une chute brutale de la résistance électrique à très basse température. Mais les supraconducteurs ne sont pas simplement des matériaux très peu résistants. Ce sont également des matériaux qui ont tendance à expulser les champs magnétiques externes. Ce phénomène est appelé l'effet Meissner [5] et a été découvert un peu plus tard, en 1933. Tous ces phénomènes nouveaux et surprenants restent incompris dans leur ensemble dans la première moitié du 20^e siècle, malgré quelques avancées notables, notamment avec la théorie de London [6] (1935) et Ginzburg-Landau [7] (1950). La première théorie microscopique de la supraconductivité est développée en 1957 par John Bardeen, Leon N. Cooper, et Robert Schrieffer (BCS) [8]. Ce phénomène intriguait et intéressait beaucoup les physiciens, mais n'était pas très utile à cause des basses températures nécessaires pour observer le phénomène - en 1973, la plus haute température à laquelle la supraconductivité avait été observée était 23K. On appelle d'ailleurs température critique - T_C - la température en dessous de laquelle les effets supraconducteurs apparaissent. Cependant, en 1986, deux scientifiques d'IBM [9] découvrent une nouvelle classe de supraconducteurs permettant le phénomène à plus haute température - seulement 30K pour ce premier matériau. Ces matériaux sont appelés cuprates et sont des sortes de céramiques composées de plans d'oxyde de cuivre (CuO_2) séparés par d'autres couches appelés réservoirs de charges (voir la figure 1.1a).

Les températures critiques actuelles dans les cuprates atteignent les 130K [10] sous pression ambiante. Sous très haute pression (270 GPa, soit environ 2 700 000 fois la pression atmosphérique), d'autres classes de matériaux ont même atteint une température de transition à la température de la pièce - qui ne devait pas être très chauffée - aux alentours de 290K, soit 15°C [11].

Du côté théorique, cette nouvelle classe de matériaux supraconducteurs n'obéit malheureusement pas à la théorie BCS. Beaucoup d'efforts ont été cependant faits pour essayer de comprendre le phénomène. C'est aujourd'hui le modèle de Hubbard [12] - dont la résolution approchée a été facilitée par l'introduction de la DMFT [13] (voir la partie 2) - qui est au centre de l'attention. En effet, il permet de décrire la plus grande partie des phénomènes et des phases de la matière à l'œuvre au sein des cuprates. C'est une version un peu plus réaliste de ce modèle - le modèle d'Emery [14] - que j'ai étudié dans mon projet de maîtrise et que je rapporte ici. Le but principal du projet est donc de voir quels phénomènes influencent la température critique au sein du modèle et notamment d'étudier le rôle particulier des atomes d'oxygène. Une partie du contenu de ce mémoire a donné lieu à une publication (voir la référence [15]).

Chapitre 1

Supraconductivité dans les cuprates

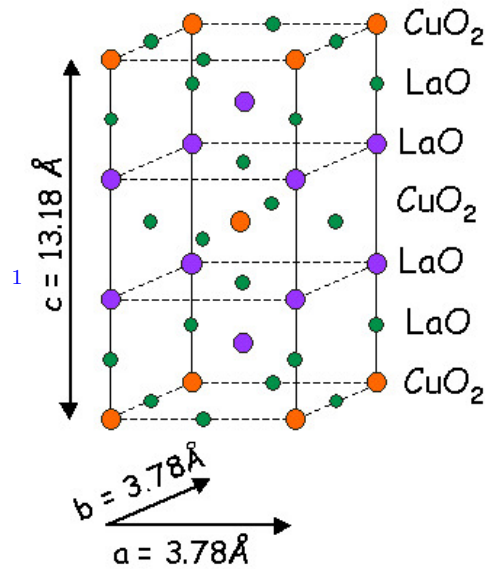
1.1 Motivations

1.1.1 Introduction au diagramme de phase

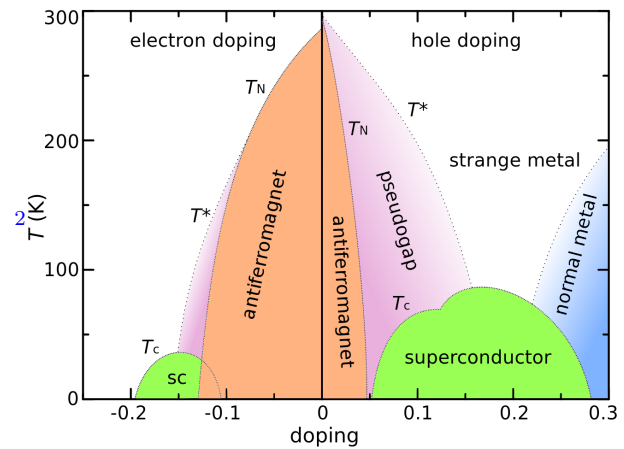
Les cuprates sont des matériaux composés de couches alternées d'oxyde de cuivre et de réservoirs de charges. Sur la Figure 1.1a, je montre l'exemple du composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ - ou LSCO pour simplifier - qui présente exactement cette structure. Les deux types de couches ont des rôles très différents : la couche de cuivre-oxygène est responsable de la supraconductivité et le réservoir de charges permet de doper le matériau. En effet, dans les composés LSCO, un atome de lanthane a trois électrons de valence qu'il partage avec ses voisins. Un atome de strontium, lui, en a seulement deux. Remplacer un atome de lanthane par un atome de strontium réduit donc d'un le nombre d'électrons partagé avec les voisins. Pour assurer la stabilité du composé, un électron doit venir d'autre part. La couche d'oxyde de cuivre (CuO_2) fournit alors cet électron qui change de couche et laisse un trou - électron manquant - dans la couche de cuivre-oxygène : on a réussi à **doper** la couche. Comme on a rajouté un trou dans la couche de cuivre, le matériau résultant est dit dopé en trous. Il est également possible de doper en électrons - donc de rajouter des électrons. Pour ce faire, on peut remplacer le lanthane par d'autres atomes compatibles (cérium) ou bien modifier le nombre d'atomes d'oxygène dans les couches de réservoir de charge par exemple. Le matériau non dopé est appelé le composé parent, ici il s'agit du La_2CuO_4 .

On remarque, dans la formule chimique du composée LSCO, la présence d'une variable muette x . Cette variable correspond au nombre d'atomes de lanthane remplacé par des atomes de strontium. Avec le raisonnement précédent, on voit que ce x correspond exactement au nombre de trous ajouté dans le matériau, par unité élémentaire du matériau. On appelle x le **dopage** dans ce composé. Le dopage est un paramètre très important des cuprates et les propriétés de ceux-ci dépendent fortement de cette variable. On représente habituellement le diagramme expérimental des cuprates dans une figure dépendant de la température et du dopage (1.1b). Mon projet de maîtrise se base sur ce diagramme qui permet de visualiser et de résumer les phénomènes en cause dans le comportement de ces matériaux. Comme je viens de le dire, on peut doper les cuprates en électrons (à gauche) ou bien en trous (à droite). On observe du côté gauche du diagramme un état antiferromagnétique (orange) beaucoup plus important que du côté droit, puis une phase supraconductrice (vert), elle, beaucoup plus écrasée que de l'autre côté. La phase supraconductrice présente des températures critiques bien plus basses de ce côté-ci. Elle est par conséquent moins étudiée, et ce projet se concentre principalement sur le côté dopage en trous - à droite - du diagramme.

Sans dopage, le matériau est donc un isolant antiferromagnétique. Il ne présente pas ou peu de supraconductivité pour les premières valeurs de dopage en trous. Puis, au fur et à mesure que le dopage augmente - en allant vers la droite du graphe, à partir de $x_{min} \approx 5\%$, une phase supraconductrice apparaît. Cette région dans laquelle la température critique (T_C) augmente avec le dopage est appelée le régime sous-dopé. T_C atteint ensuite un maximum, en général autour de $x_{opt} \approx 16\%$. Le dopage correspondant est appelé dopage optimal. Après cette valeur de dopage optimal, on entre dans le régime surdopé dans lequel la température critique T_C décroît. La supraconductivité disparaît alors pour des valeurs de dopage plus grandes ($x_{max} \approx 27\%$) et le matériau devient un métal.



(a) Structure du La_2CuO_4 . On observe une alternance de couches d'oxyde de cuivre (CuO_2) et de réservoir de charge (LaO). Un cuprate réel est composé de tels pavés mis les uns à côté des autres ou empilés les uns sur les autres.



(b) Diagramme de phase des cuprates. Un dopage positif correspond à un ajout de trous sur les couches d'oxyde de cuivre. Ce mémoire se concentre principalement sur la partie droite de ce diagramme de phase.

FIGURE 1.1

1.1.2 Le plan d'oxyde de cuivre

Depuis le début, je vous parle de dopage sur les plans d'oxyde de cuivre (CuO_2). Doper en trous revient donc à retirer des électrons de ce plan. Mais que signifie un dopage en pourcentage, on ne peut pas enlever des pourcentages d'électron d'un atome. Soit on en retire, soit on n'en retire pas. En réalité, ce pourcentage est obtenu en faisant la moyenne sur plusieurs mailles élémentaires du cristal. Une maille élémentaire du composé parent La_2CuO_4 contient 2 atomes de lanthane, un atome de cuivre et 4 atomes d'oxygène. Lorsque l'on veut passer à $x \neq 0$, on substitue des atomes de lanthane par des atomes de strontium seulement dans une

1. Issu sans modifications de <http://hoffman.physics.harvard.edu/materials/CuprateIntro.php>

2. Issu sans modifications de https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Cuprates_phasediagram_en.svg

proportion x des mailles élémentaires. Un dopage de 5% correspond donc à une substitution d'un atome de lanthane par un atome de strontium dans 5% des mailles élémentaires. Par le mécanisme de dopage, le plan CuO_2 a donc des électrons en moins dans seulement une proportion x des mailles élémentaires. Comme c'est ce plan d'oxyde de cuivre qui est censé être à l'origine de la supraconductivité, je vais maintenant me concentrer uniquement sur celui-ci et oublier les couches de réservoir de charge. Leur influence ne va donc être que la possibilité de doper la couche d'oxyde de cuivre.

Ensuite, l'électron arraché de la couche CuO_2 lors du dopage provient-il des atomes de cuivre ou bien des atomes d'oxygène et dans ce cas, quel atome d'oxygène? En réalité, au sein de certaines mailles élémentaires l'électron va être enlevé aux atomes d'oxygène, chez d'autre aux atomes de cuivre et les électrons disponibles dans le composé parent peuvent se répartir différemment sur les sites atomiques. Le cuivre possède un total de 29 électrons, et chaque atome d'oxygène, 8. Il serait possible en théorie d'arracher un total de 45 électrons de chaque maille élémentaire du matériau. Ce n'est pas possible en réalité, car cela demanderait des énergies immenses qui ne sont pas réalistes dans les conditions expérimentales. Seuls les électrons de valence (c'est-à-dire les électrons qu'il est le plus facile d'arracher) entrent en jeu dans la physique de la matière condensée qui ne s'occupe pas des hautes énergies. Ici, il y a un total de 5 de ces électrons dans le matériau parent : un sur l'atome de cuivre et deux sur chaque atome d'oxygène. Je considère donc 3 orbitales électroniques différentes, une pour chaque atome de la maille élémentaire.

En passant, on remarque que le dopage maximal atteignable avec la technique de substitution et les atomes présentés est de 100% - si on rajoute plus d'un électron par maille élémentaire, on commence à remplir de nouvelles orbitales atomiques³ et on doit alors changer le modèle et considérer plus de bandes. Heureusement, comme vous pouvez le voir sur la figure 1.1b, les dopages habituels sont de l'ordre de la dizaine de pourcent.

Le modèle habituellement considéré lorsqu'on ne souhaite pas étudier directement les atomes d'oxygène est celui à une bande, dans lequel on n'étudie que le comportement des 2 états moléculaires les plus hauts en énergie⁴ dans la maille élémentaire. Dans ce modèle, le composé parent correspond à une occupation de 1 électron⁵ par maille élémentaire. C'est la raison pour laquelle l'état à dopage nul - correspondant aux composés parents - est surnommé le *demi-remplissage*. J'utiliserai ce terme dans le reste du mémoire. Pour résumer :

$$\begin{aligned}\text{Composé parent} &= \text{Dopage nul} \\ &= \text{Demi-remplissage} \\ &= 5 \text{ électrons de valence par maille élémentaire}\end{aligned}$$

1.1.3 Résultats expérimentaux

Ce projet s'inspire d'un article expérimental [2] qui étudie exactement cela, à savoir la répartition des électrons au sein de la maille élémentaire. Dans cet article, des mesures de

3. On se souvient que le principe d'exclusion de Pauli indique qu'une orbitale atomique peut contenir un maximum de deux électrons

4. Ces états sont des superpositions d'électrons sur les atomes de cuivre et d'oxygène. Dans la suite de ce mémoire, j'utilise le terme d'électron pour dénoter ces états lorsque je décris le modèle à une bande

5. Selon la remarque précédent, il ne s'agit pas exactement d'un électron réel mais d'une superposition d'électrons

RMN (Résonance Magnétique Nucléaire) sont utilisées pour démontrer une corrélation entre la température critique maximale et le dopage sur les sites d'oxygène. Cette corrélation est démontrée grâce à des données provenant de nombreux matériaux. La Figure 1.2 illustre très bien cette corrélation. Bien que les interpolations des données semblent quelque peu exagérées - en particulier pour la courbe violette - on voit bien qu'une augmentation du dopage en trous sur les sites d'oxygène entraîne des valeurs plus grandes de températures critiques. Pour reformuler, plus les électrons ont tendance à se regrouper sur les sites de cuivre, plus la température critique est élevée. L'objectif du projet est de voir si des résultats théoriques et des simulations permettent d'obtenir un diagramme de phase similaire et si cette corrélation peut s'expliquer théoriquement. Comme montré sur la Figure 3.11b, j'ai réussi à reproduire la forme générale des résultats expérimentaux. Avant de les étudier, il me faudra bien sûr expliquer beaucoup de concepts. Au cours de ce mémoire, je tenterai également de fournir une intuition physique basée sur le résultat des simulations et d'autres résultats permettant de comprendre cette corrélation.

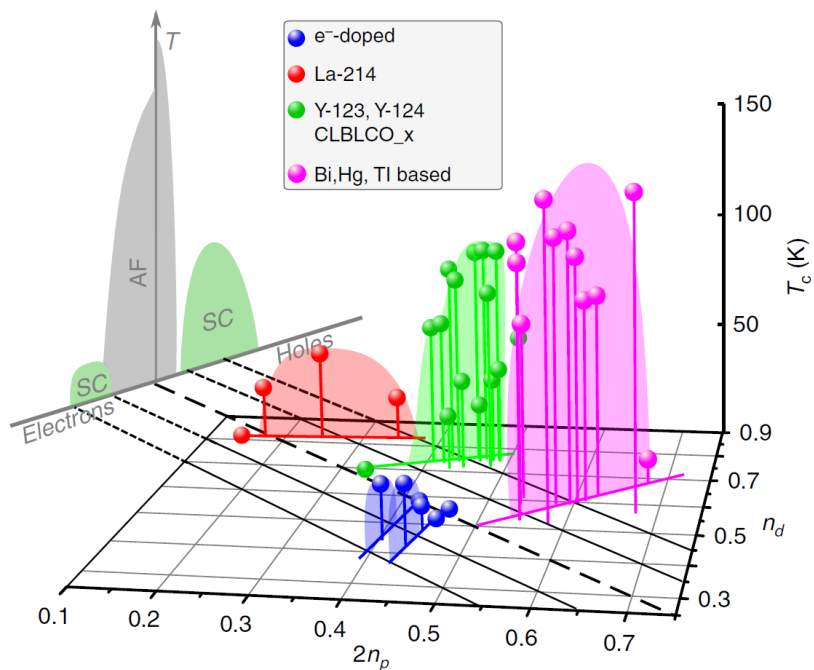


FIGURE 1.2 – Diagramme de phase⁶ en 3 dimensions représentant la température critique supraconductrice en fonction des dopages atomiques sur site. $2n_p$ correspond au dopage sur les sites d'oxygène pour une maille élémentaire, tandis que n_d correspond au dopage sur le site de cuivre.

6. Ce diagramme est une reproduction de la Figure 2 de [2]

1.2 Modélisation des cuprates

1.2.1 Considérations physiques

Dans cette section, je présente l'Hamiltonien permettant dans ce projet de décrire les électrons dans les cuprates. Beaucoup de travaux de recherche se sont déjà intéressés au modèle à une bande, qui ne considère, pour faire simple, que les atomes de cuivre dans les couches CuO_2 [12, 16, 17]. Comme discuté précédemment, je cherche ici à voir l'effet de l'occupation sur les sites d'oxygène sur la supraconductivité. Je me dois donc d'inclure les atomes d'oxygène dans le modèle. Comme indiqué précédemment, je vais m'intéresser à trois orbitales différentes. Je considère alors un Hamiltonien de Hubbard à trois bandes. J'utilise le formalisme de la seconde quantification qui consiste, pour simplifier, à considérer les électrons comme des particules, qui obéissent au principe d'antisymétrie sous échange de deux fermions identiques. Le Hamiltonien correspond alors à une liste d'énergies que prennent ces particules quand elles sont localisées autour d'un site atomique ou lorsqu'elles passent d'un site à un autre. Je commence par une description des termes du Hamiltonien. L'analyse qui suit est résumée sur la Figure 1.3a et je vous invite à vous y référer tout au long de l'explication pour une meilleure visualisation des paramètres. Vous pouvez trouver l'expression du Hamiltonien en 1.2.2.

L'énergie cinétique Les premiers termes du Hamiltonien sont les énergies sur site. Elles sont notées ϵ_p et ϵ_d respectivement pour l'oxygène et le cuivre. Ces énergies représentent les contributions des électrons de l'orbitale d du cuivre et de l'orbitale p de l'oxygène. Ce sont les deux types d'orbitales qui ont été choisies, car ce sont les orbitales correspondant aux électrons les plus simples à arracher de la couche d'oxyde de cuivre. Bien sûr, les deux énergies sont différentes, en partie parce que les orbitales p et d ont des énergies différentes. Cette différence d'énergie provient également de la structure du matériau autour des atomes de cuivre et d'oxygène dans les couches environnantes. Ces paramètres varient selon les cuprates, comme montré dans les calculs de DFT (*Density Functional Theory*) pour le modèle à trois bandes de la référence [18]. Pour résumer, la DFT (théorie de la fonctionnelle de la densité en français) permet de déterminer pour chaque matériau les paramètres qui permettront au modèle de s'approcher au mieux de ses caractéristiques réelles (distances interatomiques, nombre d'atomes, type d'atomes, structure cristalline). Elle permet donc de choisir les paramètres pour simuler des matériaux réels.

Il y a également plusieurs termes de *saut*. Ces termes de *saut* représentent la possibilité qu'ont les électrons de passer entre les atomes du réseau, avec un certain coût énergétique. Ils correspondent en réalité aux valeurs de l'énergie cinétique entre les différentes orbitales de Wannier. On en définit trois :

- t_{pd} qui représente les sauts entre des atomes de cuivre et d'oxygène adjacents.
- t_{pp} qui représente le saut entre deux atomes d'oxygène \mathbf{x} et \mathbf{y} adjacents. Ce terme sera utilisé comme référence pour l'énergie dans le modèle, je le considérerai donc toujours égal à 1 ⁷

7. On suppose $t_{pp} = 1$ et on normalise nos énergies et températures en fonction ($k_B = 1$, $\hbar = 1$). Ce choix d'unité, que l'on appelle naturelles, permet de simplifier les notations, les calculs et l'analyse des résultats.

- $t_{pp'}$, pour finir, représente un saut entre des oxygènes seconds voisins, directement à travers l'atome de cuivre. Dans [19], cette valeur est prise égale à t_{pp} , comme dans l'article de Andersen et al. [20]. Cependant, dans les calculs de DFT de [18] cette valeur semble être 4 ou 5 fois plus faible que t_{pp} . Dans le modèle choisi ici, elle ne sera donc pas fixée et pourra alors être différente de t_{pp} .

Remarquez que je ne considère pas de saut direct entre les sites de cuivre. Enfin, tous les termes de saut changent de signe en fonction de l'alignement des parties positives et négatives des orbitales p et/ou d dans le plan. Les changements de signes sont facilement observables sur la Figure 1.3a.

Jusque là, le modèle est résoluble de façon exacte parce qu'il peut être ramené à des diagonalisations de matrices 3×3 (voir en 1.2.2), mais compliqué parce que diagonaliser une matrice 3×3 est fastidieux. Il est en revanche très facile à résoudre numériquement et je donne un aperçu de ce modèle «sans interactions» dans la partie 1.3.1. Jusqu'ici, je n'ai pas parlé du spin des électrons. En fait, les termes introduits précédemment ne permettent aucune corrélation entre les spins up et down. Dans le modèle régi par cet Hamiltonien, ils agissent comme des particules indépendantes. Il manque cependant quelque chose pour pouvoir étudier la supraconductivité, car elle repose sur les paires de Cooper. Les paires de Cooper étant des particules de spins opposés corrélées, il est nécessaire d'introduire une corrélation entre électrons de spins opposés dans cet Hamiltonien.

L'énergie potentielle J'introduis maintenant un terme permettant ces corrélations. Jusqu'ici, je n'ai pas parlé de la répulsion entre électrons liée à l'interaction Coulombienne entre deux particules chargées. Cette force joue un grand rôle dans le comportement des solides, dans lesquels les charges sont relativement proches les unes des autres. En théorie, tous les électrons devraient sentir des répulsions provenant de tous les autres électrons du système. Mais, vu que le matériau est plein de charges réparties plus ou moins régulièrement, seules les particules très proches les unes des autres auront un effet entre elles. On appelle cela l'écrantage. Ici, je pourrais donc considérer les interactions entre spins sur le même site atomique ou même entre électrons sur des sites voisins. Tenir compte de tous ces termes rend le problème très complexe. Des études précédentes, utilisant différentes techniques [21, 22] ont montré que le terme d'interaction dominant était le terme d'interaction sur les sites de cuivre. Ils mentionnent également le fait que ces autres termes d'interaction ont peu d'influence sur le comportement des matériaux. Je ne considérerai donc que les interactions sur les sites de cuivre entre des électrons de spins différents - à cause du principe de Fermi. Le terme correspondant dans le Hamiltonien s'écrit $Un_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d$. Cela veut simplement dire que les états dans lesquels sur un site i de cuivre (d) il y a un électron de spin up et un électron de spin down verront leur énergie augmentée de U .

Ce simple terme d'interaction rend déjà la théorie beaucoup plus difficile à résoudre, puisqu'il n'existe pas de simplification du même ordre que dans le cas sans interactions ($U = 0$). J'aurai donc besoin d'utiliser des méthodes plus sophistiquées, et de faire des approximations.

Toutes les valeurs dans le texte seront donc exprimées en unités de t_{pp} sauf mention contraire.

1.2.2 Les équations

Le Hamiltonien prend donc la forme :

$$H = H_{\text{site}} + H_{\text{saut}} + H_{\text{int}}$$

$$\begin{aligned}
 H_{\text{site}} &= \sum_{i,\sigma} \epsilon_d d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \epsilon_p p_{i\sigma}^{x\dagger} p_{i\sigma}^x + \epsilon_p p_{i\sigma}^{y\dagger} p_{i\sigma}^y \\
 H_{\text{saut}} &= t_{pd} \sum_{i,\sigma} d_{i\sigma}^\dagger (p_{i\sigma}^x - p_{(i_x-a,i_y)\sigma}^x - p_{i\sigma}^y + p_{(i_x,i_y-a)\sigma}^y) + h.c. \\
 &\quad + t_{pp} \sum_{i,\sigma} p_{i\sigma}^{x\dagger} (p_{i\sigma}^y - p_{(i_x+a,i_y)\sigma}^y - p_{(i_x,i_y-a)\sigma}^y + p_{(i_x+a,i_y-a)\sigma}^y) + h.c. \\
 &\quad + t_{pp'} \sum_{i,\sigma} p_{i\sigma}^{x\dagger} p_{(i_x+a,i_y)\sigma}^x + p_{i\sigma}^{y\dagger} p_{(i_x,i_y+a)\sigma}^y + h.c. \\
 H_{\text{int}} &= U \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

où $d_{i\sigma}^\dagger$ (respectivement $p_{i\sigma}^{x\dagger}, p_{i\sigma}^{y\dagger}$) crée un électron sur le site de cuivre (resp. oxygène x , oxygène y) de la maille élémentaire i avec un spin σ et $d_{i\sigma}$ (resp. $p_{i\sigma}^x, p_{i\sigma}^y$) détruit de même un électron.

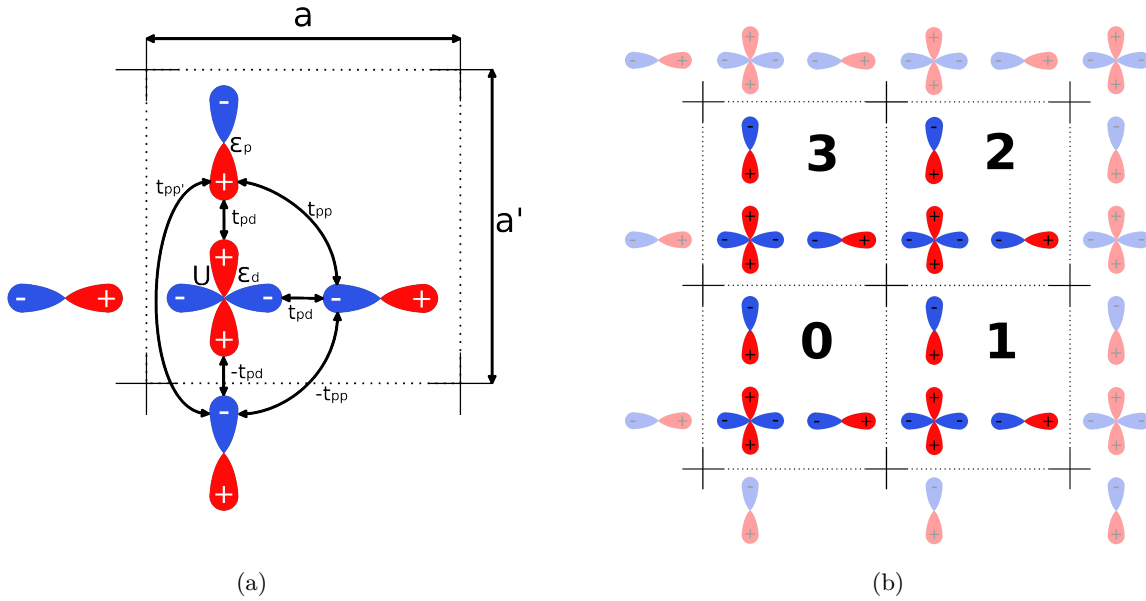


FIGURE 1.3 – a) Représentation graphique du modèle à trois bandes et de ses paramètres. Je représente sur cette image un atome de cuivre et ses orbitales $d_{x^2-y^2}$ au centre entouré par 4 atomes d'oxygène et leurs orbitales p^x et p^y selon leurs positions relatives au cuivre. b) Représentation de l'amas utilisé dans la méthode de résolution du Hamiltonien. À ce stade, l'image permet de visualiser la structure du réseau de mailles CuO₂. Elle permettra ensuite une meilleure compréhension de la méthode de résolution.

Les couches CuO_2 sont par définition en 2D, donc l'indexation de la maille élémentaire utilise un vecteur 2D $\mathbf{i} = na\mathbf{x} + na'\mathbf{y}$, où a et a' sont les distances intermailles dans les deux directions. Encore pour permettre les calculs numériques, je fixe $a = 1$. Comme dans les vrais matériaux, on a $a \approx a'$, je considère une symétrie entre les axes \mathbf{x} et \mathbf{y} et je fixe $a = a' = 1$.

Je vais maintenant simplifier la forme du Hamiltonien en me plaçant dans l'espace réciproque (ou espace des \mathbf{k}) en utilisant

$$c_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{Z.B.}} e^{-j\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}} c_\sigma^\dagger(\mathbf{k}) \quad c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \text{Z.B.}} e^{j\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}} c_\sigma(\mathbf{k}) \quad (1.2)$$

où c peut être d , p^x ou p^y ⁸ et N est le nombre total de mailles élémentaires du cristal. Remarquez que dans le terme de phase de la transformée de Fourier (l'exponentielle), est présent le produit $\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}$ où \mathbf{i} est le vecteur de coordonnées de la maille élémentaire et ce indépendamment du type de site considéré (oxygène ou cuivre). Cela signifie que le modèle considère la maille élémentaire comme unité du système, ne tient pas compte explicitement de la position des différents atomes au sein de la maille élémentaire qui est contenue dans la définition des opérateurs d , p^x et p^y . Cette convention est utilisée dans la référence [19] mais pas dans la référence [20, 18, 23]. Ce choix de base est arbitraire et ne change pas le comportement du système. Cependant et comme je le montre plus tard en 3.2.2, il faut faire attention en introduisant des corrections liées au potentiel vecteur qui lui dépend de la position. En effet, les positions relatives des atomes d'oxygène dans les mailles élémentaires auront un effet sur les quantités physiques. En revenant au Hamiltonien, le passage dans l'espace réciproque⁹ transforme $H_{\text{site}} + H_{\text{saut}} \hat{=} H_0$ en la somme de produits de matrices suivante :

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger h_0(\mathbf{k}) C_{\mathbf{k}\sigma}$$

$$C_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} d_\sigma(\mathbf{k}) \\ p_\sigma^x(\mathbf{k}) \\ p_\sigma^y(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

$$h_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \epsilon_d & t_{pd}(1 - e^{ik_x}) & t_{pd}(1 - e^{ik_y}) \\ t_{pd}(1 - e^{-ik_x}) & (\epsilon_p - 2t_{pp}) + 2t'_{pp} \cos k_x & t_{pp}(1 - e^{-ik_x})(1 - e^{ik_y}) \\ t_{pd}(1 - e^{-ik_y}) & t_{pp}(1 - e^{ik_x})(1 - e^{-ik_y}) & (\epsilon_p - 2t_{pp}) + 2t'_{pp} \cos k_y \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

En réalité, si vous faites vous-mêmes la transformation, vous n'obtiendrez pas exactement cette forme. En effet, ϵ_p a été renormalisé en $\epsilon_p - 2t_{pp}$ pour suivre ce qui est décrit dans la référence [20] et utilisé dans la référence [19]. Encore une fois, cette convention n'est pas suivie dans les références [18, 23]. De plus, dans le programme utilisé (voir la partie 2) pour les simulations et au cours de ce mémoire, je considérerai une translation des énergies pour avoir 0 dans le coin en haut à gauche de la matrice $h_0(\mathbf{k})$. C'est-à-dire que je fais la transformation $\epsilon_d \rightarrow 0$ et $\epsilon_p \rightarrow \epsilon_p - \epsilon_d$. Enfin, il faut ajouter un terme $-\mu \sum_{\mathbf{k}\sigma} (n_{\mathbf{k}\sigma}^d + n_{\mathbf{k}\sigma}^{p^x} + n_{\mathbf{k}\sigma}^{p^y})$ avec μ appelé le potentiel chimique, qui permet de contrôler le dopage du système.

8. C'est la transformation dont je parlais dans 1.2.1

9. qui est simplement une transformation de Fourier

Le premier objectif de cette maîtrise était de déterminer l'influence de ϵ_p sur l'état supraconducteur des cuprates. En effet, dans l'article [18], on voit que ϵ_p peut varier du simple au double dans les cuprates étudiés. De leur côté, t_{pp} and t_{pd} varient bien moins significativement. On remarque cependant que t'_{pp} varie aussi très significativement sur tous les matériaux présentés. De plus, ϵ_p correspond environ à l'énergie des électrons sur les atomes d'oxygène. En augmentant sa valeur, il va être plus difficile pour les électrons d'aller sur les sites d'oxygène et on va donc changer la teneur en électrons sur ces sites. C'est le paramètre qui va influencer le plus directement (par ce raisonnement simple) le dopage sur les sites d'oxygène.

Je me suis ensuite tourné vers les autres paramètres (U , t_{pd} et t'_{pp}) pour voir si ce que j'avais observé était simplement une corrélation liée aux énergies sur site, ou si je pouvais tirer des conclusions plus générales sur l'effet du dopage en oxygène.

1.2.3 Choix des paramètres

Je dois maintenant choisir les valeurs des paramètres, qui, au passage, sont généralement nommés des paramètres microscopiques. Quatre paramètres varient dans le modèle - ϵ_p , U , t_{pd} et t'_{pp} - puisque t_{pp} a été fixé à 1 et ϵ_d à 0.

Une façon de déterminer les valeurs des paramètres est de prendre les valeurs mesurées dans les vrais matériaux. Bien sûr, le modèle de Hubbard ne décrit pas exactement les matériaux réels et il n'est pas possible de mesurer expérimentalement ces paramètres. Cependant, la DFT citée précédemment permet de trouver les paramètres permettant au modèle de s'approcher au mieux du matériau.

Une autre façon de choisir les paramètres est de chercher des propriétés qui permettraient de mieux comprendre le modèle. Dans [19], les auteurs voulaient séparer les bandes d'oxygène et de cuivre dans le modèle sans interaction afin d'étudier un régime de paramètres avec moins de corrélation cuivre-oxygène. Ils voulaient aussi avoir un gap de transfert de charge clair (voir 1.3.2).

Au début du projet, j'ai commencé par utiliser les paramètres choisis dans la référence [19]. En effet, dans cet article, les auteurs utilisent le programme¹⁰ que j'avais à disposition et c'était donc un bon point de départ pour étudier le comportement dans cette région. D'autres travaux ont également utilisé ces mêmes paramètres à température nulle, par exemple à la référence [23], ce qui rendait plus simple pour moi la comparaison des résultats, afin d'être certain que le programme¹⁰ se comportait comme voulu. Puis, j'ai voulu passer à un régime de paramètres qui approche mieux les matériaux réels, car le but était de reproduire les résultats expérimentaux. Cependant, le programme utilisé¹⁰ ne permet pas d'étudier un tel régime de paramètres à cause du problème de signe (voir 2.1.1) qui apparaît pour ce régime de paramètres. Pour cette raison, les simulations ne convergent pas bien, et les résultats ne sont pas exploitables, notamment à des températures suffisamment basses pour voir la supraconductivité apparaître. À cause de cette difficulté, je me suis donc concentré sur les paramètres choisis dans la référence [19] permettant d'avoir un gap de transfert de charge bien visible. J'ai également étudié tout un ensemble de paramètres autour de ce point pour étudier le comportement du modèle. Pour fixer les idées, je donne ici l'ensemble de paramètres principalement utilisés dans ce projet. Dans ce mémoire, j'ai nommé point de départ les

10. voir la partie 2

paramètres suivants : ¹¹

$$t'_{pp} = 1.0, t_{pd} = 1.5, \epsilon_d = 0, \epsilon_p = 9, U = 12. \quad (1.4)$$

L'objectif est donc d'étudier le comportement du système autour de ces paramètres. La procédure que j'ai utilisée consiste à faire varier un paramètre à la fois et garder tous les autres paramètres fixés. Cela revient à étudier les dérivées des observables dans les directions principales. Tous les résultats présentés dans ce mémoire ne diffèrent que d'une valeur de paramètres du point de départ (1.4). Le paramètre changé ainsi que sa valeur sont le plus souvent indiqués en légende. J'ai donc étudié des valeurs des différents paramètres dans les spectres suivants :

$$\begin{aligned} t'_{pp} &\in [0.3, 1.8] \\ t_{pd} &\in [1.3, 1.7] \\ \epsilon_p &\in [8, 9.5] \\ U &\in [11.75, 13]. \end{aligned}$$

1.3 Étude préliminaire du modèle

1.3.1 Intuitions

Je viens d'introduire un Hamiltonien constitué de deux termes : H_0 et H_{int} . H_0 est soluble de façon exacte, mais ajouter le terme d'interaction empêche complètement cette résolution. Il faut donc trouver une autre méthode pour étudier le modèle. La première idée que l'on peut avoir pour résoudre ce problème est d'appliquer la théorie des perturbations, si l'on suppose que H_{int} est petit par rapport à H_0 . Cette première idée pourrait être justifiée dans un régime où U est plus petite que toutes les autres échelles d'énergies du système. Malheureusement, ce n'est pas du tout le cas ici : le terme d'interaction est très grand. Je pourrais aussi considérer que U est le terme prédominant, et considérer le terme cinétique comme une perturbation. Toutefois, une fois encore, cela ne donne pas de bons résultats dans la région d'intérêt, à savoir le dôme supraconducteur. De plus, au vu des valeurs des paramètres choisis, aucune approximation de la sorte n'est possible, les termes de H étant d'amplitude comparable.

Avant d'introduire les méthodes et approximations utilisées pour résoudre le modèle général et reproduire les résultats expérimentaux, je vais vous présenter le comportement du modèle sans interactions. L'étude de la structure de bande et de la densité d'états permettront de développer une intuition physique pour l'effet d'un changement de paramètres sur le système.

1.3.2 Résolution sans interactions et gap de transfert de charge

La Hamiltonien sans interactions est maintenant très simple à résoudre. En effet, le travail le plus dur a été fait en passant dans la base des \mathbf{k} . Il suffit maintenant de diagonaliser quelques ¹² matrices 3×3 et le tour est joué. De là, il est possible d'obtenir la densité d'états

11. Attention encore une fois, j'ai renormalisé ϵ_p en $\epsilon_p - 2t_{pp}$ dans le Hamiltonien comme dans la référence [19] mais pas dans les références [18, 23]. Les valeurs de ϵ_p que je donne ici sont donc plus grandes de $2t_{pp}$ par rapport à ces deux articles.

12. une pour chaque valeur de \mathbf{k}

qui donne la répartition des états du système en fonction de leur énergie. Cette densité d'états est une très bonne aide pour visualiser le comportement des électrons qualitativement. Comme il y a ici deux types de sites atomiques, je sépare leurs densités d'états. On se retrouve alors avec une densité d'états pour les sites de cuivre et une pour les sites d'oxygène.

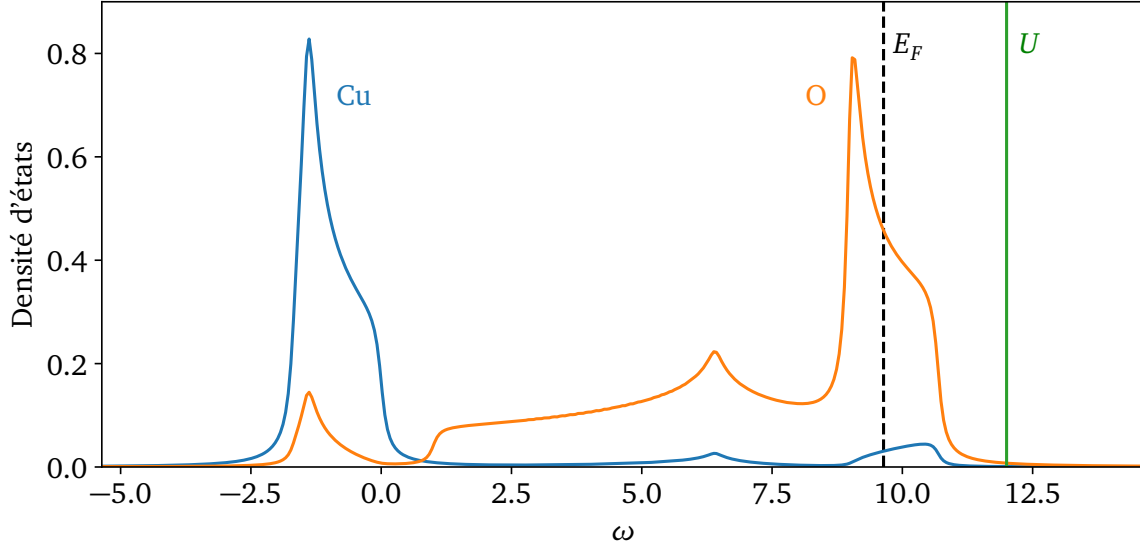


FIGURE 1.4 – La densité d'états du modèle sans interactions en fonction de l'énergie du système pour les paramètres (1.4). Les densités d'état des sites oxygènes et cuivres sont séparées sur le graphe pour observer la distribution des bandes. Le graphe est centré sur l'énergie de Fermi, correspondant au demi-remplissage (5 électrons par maille élémentaire), représentée par la ligne noire pointillée. Si on rajoute les interactions, le niveau de Fermi se situe plus à droite sur ce graphe, proche de la fin de la bande d'oxygène. La valeur de U est donnée par la ligne verticale verte. On observe bien la séparation des types d'états ainsi que la présence d'un gap de transfert de charge (défini ici comme l'espace entre la partie supérieure de la densité d'oxygène et la valeur de U).

Je trace sur la figure 1.4 la densité d'états (ou *DOS* pour *Density of States*) pour le point du départ dans l'espace des paramètres (1.4). Rappelez-vous que ce point de départ est censé présenter une séparation entre les couches de cuivre et d'oxygène ainsi qu'un gap de transfert de charge visible. C'est de cette façon qu'il a été choisi.

On observe effectivement que les deux couleurs (bleu et orange) sont bien séparées. On a tout de même un peu de densité orange sous le pic bleu autour de $\omega = -2$ et un peu de bleu au niveau de Fermi. Cette superposition provient du fait que les bandes sont hybridées (à cause des intégrales de transfert t_{pp} , t_{pd} et t'_{pp}).

Ensuite, la solution est censée avoir un gap de transfert de charge bien marqué. Mais je n'ai pas encore défini ce qu'est le gap de transfert de charge. Tout d'abord, un gap est défini par une plage d'énergies dans laquelle la densité d'état (ou poids spectral) est nulle et délimitée de part et d'autre par des zones où cette densité est non nulle. Ici par exemple, il y a un petit gap autour de $\omega \approx 1$ entre les deux zones principales des courbes bleue et orange. Ensuite, on appelle gap de transfert de charge, un gap qu'il y a entre deux bandes de nature différente.

En effet, la charge de l'électron doit effectivement être transférée d'un site atomique à un autre pour pouvoir franchir ce gap. Le gap que je viens de considérer est donc bien un gap de transfert de charge entre du cuivre et de l'oxygène. Cependant, quand je parle **du** gap de transfert de charge, je ne parle pas de celui-là¹³, notamment parce qu'il est très loin des niveaux d'énergie qui m'intéressent.

En effet, comme je l'ai dit plus haut, les matériaux considérés sont proches d'avoir une occupation totale de 5 électrons par maille élémentaire. Je trace d'ailleurs, par une ligne pointillée sur la figure 1.4, l'énergie du système quand il comporte 5 électrons. Le gap de transfert de charge que je souhaite étudier se situe donc plus proche de cet endroit. Pour comprendre ce qu'est le gap de transfert de charge, il faut comprendre qualitativement le rôle de U dans cette région. Dans le modèle sans interactions ($U = 0$), il n'y a plus d'états au-delà de l'énergie $\omega = 11$ environ sur le graphe. Tous les états de cuivre sont donc décrits par la courbe bleue. On se rappelle que U correspond à l'énergie additionnelle que le système acquiert quand deux électrons sont sur le même site de cuivre. Cet ajout d'énergie survient lorsqu'un électron se déplace vers un site de cuivre déjà occupé. Le modèle sans interactions ne tient pas compte de ce ajout. Je vais vous donner une idée de l'effet de U sur le système sans interactions en simplifiant à l'extrême. Quand on considère $U \neq 0$, le deuxième électron sur un site de cuivre a une énergie qui se situe environ au niveau de $U + \epsilon_d$ ¹⁴. En effet, à l'énergie qu'il acquiert en se mettant aux alentours du site de cuivre vient se rajouter l'énergie supplémentaire parce qu'il se retrouve proche d'un autre électron. L'effet de U est alors de diviser les états de cuivre en deux bandes, l'une au niveau de celle que l'on voit sur le graphe et la deuxième au niveau de la valeur de U . Le demi-remplissage dans un tel système se situe donc en réalité autour de $\omega = 11$. Le gap de transfert de charge est alors à cet endroit également entre la bande supérieure d'oxygène - qui est la bande de valence - et la bande supérieur du cuivre - qui est, elle, la bande de conduction. Le gap de transfert de charge est donc le gap qu'un électron de valence doit sauter pour pouvoir entrer la bande de conduction et être excité.

Le gap de transfert de charge peut être approché grâce à cette simplification par la différence entre les énergies des deux états l'entourant. Un électron sur un site d'oxygène ayant une énergie d'environ ϵ_p et un électron sur un site de cuivre doublement occupé $U + \epsilon_d$, on peut approcher la largeur du gap de transfert de charge par $\Delta_{CT} \approx (U + \epsilon_d) - \epsilon_p = U - (\epsilon_p - \epsilon_d)$ ¹⁵. La figure 4 dans la référence [19] montre la densité d'états du système avec interactions cette fois-ci. On y observe un gap de transfert de charge à un dopage de zéro autour du niveau de Fermi. On voit que ce gap semble être plus faible que l'approximation $U - (\epsilon_p - \epsilon_d) \approx 3$. Cela est bien sûr dû aux autres paramètres du modèle qui viennent modifier la largeur des bandes atomiques.

Je présente enfin la structure de bande du modèle sans interactions dans la figure 1.5. On peut y voir la bande basse principalement composée d'états de cuivre et la bande haute principalement composée d'états d'oxygène. La bande intermédiaire présente, elle, une plus forte hybridation, notamment autour de $\mathbf{k} = (\pi, \pi)$. Cette structure de bande est importante pour comprendre le système avec interactions, mais n'est bien sûr plus valide dès que $U \neq 0$.

13. remarquez que dans ce cas, les deux critères de choix des paramètres auraient été redondants

14. au niveau du trait vert sur le graphe

15. En réalité, il faut tenir compte de beaucoup d'autres paramètres, en particulier les paramètres de saut dans ce modèle. Je montrerai plus tard comment ces paramètres affectent le gap [24]

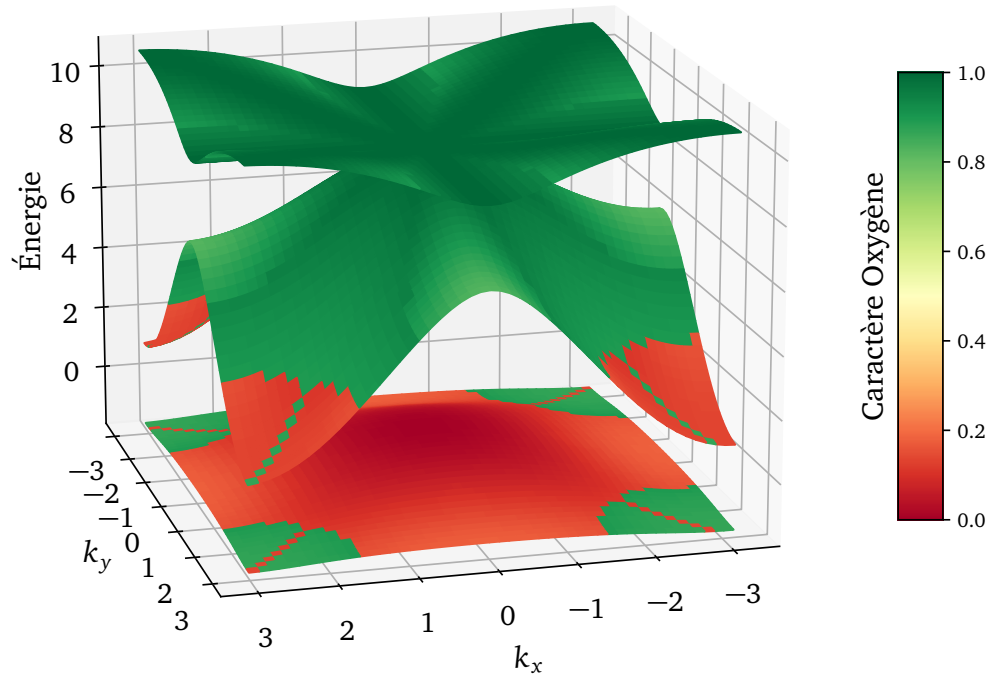


FIGURE 1.5 – La structure de bandes au point de départ (1.4). Les bandes correspondent aux valeurs propres du système. Pour chaque valeur de \mathbf{k} , il y a 3 états propres donc trois bandes en tout. À ces valeurs propres sont associées des vecteurs propres que l'on peut exprimer dans la base des orbitales (d, p^x, p^y) . Le *caractère* oxygène est le module de la projection de l'état propre en question sur le plan (p^x, p^y) .

Chapitre 2

Les méthodes

Dans cette section, je présente les méthodes utilisées pour résoudre le modèle. Comme dit précédemment, il n'est pas possible de faire une approximation en considérant des électrons indépendants auxquels on ajouterait l'interaction de Coulomb comme une perturbation. Il est donc impossible de penser en termes de bandes puisque les vecteurs de l'espace réciproque ne sont plus des variables adaptées. Je vais donc introduire des méthodes bien plus compliquées qu'un simple changement de base et une diagonalisation. Je vais tout d'abord présenter la théorie de champ moyen dynamique (DMFT pour *Dynamical Mean-Field Theory*). Il s'agit d'une méthode de résolution et d'approximation locale inventée dans les années 90 peu après la découverte des supraconducteurs à haute température critique, qui a été développée justement pour décrire les systèmes fortement corrélés [13, 25]. La DMFT n'est pas exactement la méthode que j'ai utilisée pendant ma maîtrise, mais il convient de la présenter pour pouvoir comprendre le programme que j'ai utilisé. Ce programme s'appelle CT-Seg-3B et est accessible au lien suivant : <https://github.com/kown2801/CT-Seg-3B>.

Le principe de base de cette méthode est de remplacer le problème sur le réseau tout entier par un problème similaire, mais sur un système plus petit et donc plus facile à résoudre. En effet, il faut bien avoir en tête que la dimension de l'espace vectoriel associé au problème évolue exponentiellement avec la taille du système. Un système composé de plus de 100 atomes commence à être impossible à résoudre sur les machines d'aujourd'hui. Or 100 atomes ne permettent pas de décrire un cristal qui en contient en réalité de l'ordre de 10^{20} . On appelle ce petit système une **impureté**. Une impureté peut par exemple être une maille élémentaire - c'est d'ailleurs la plus petite impureté qu'il est possible de prendre - mais elle peut également être plus grande. La DMFT utilise la maille élémentaire comme impureté.

Pour pouvoir faire en sorte que cette méthode donne des résultats intéressants, il faut pouvoir passer du problème sur le réseau à celui sur l'impureté. En réalité, la DMFT consiste à résoudre le modèle de Hubbard avec interaction sur une impureté qui serait plongée dans un bain d'électrons. Ce bain d'électrons a certaines *caractéristiques* qui modifient le comportement de l'impureté. À son tour, l'impureté a également un effet sur le bain autour et vient modifier ces *caractéristiques*. Ce que je nomme *caractéristiques* ici s'appelle en réalité la fonction d'hybridation. Elle sera représentée par le symbole Δ . Cette fonction représente donc l'action réciproque entre le bain et l'impureté. Pour résumer, je dois calculer deux fonctions :

- l'une qui représente les propriétés de l'impureté et qui s'obtient à partir du Hamiltonien et de la fonction d'hybridation qui représente les propriétés du bain d'électrons.
- l'autre qui représente les propriétés du bain d'électrons et qui s'obtient à partir du Hamiltonien et des propriétés de l'impureté.

Ces deux points s'assimilent à un système de deux équations indépendantes couplées qu'il faut

résoudre. Il n'est pas possible de substituer l'une dans l'autre directement de par la complexité effective de ces équations. Il faut donc employer une méthode itérative pour résoudre ce système. Dans cette première section, je vais introduire ce modèle d'impureté - appelé le modèle d'impureté d'Anderson [26] ainsi que la DMFT qui se base sur ce modèle. L'explication suivante est en grande partie basée sur la référence [13] et s'inspire également de CT-Seg-3B (qui ressemble fortement au programme introduit dans la référence [27]) notamment pour la partie à trois bandes.

2.1 Une introduction à la DMFT

2.1.1 Le modèle d'impureté d'Anderson

Pour introduire cette méthode, il me faut réfléchir dans le modèle à une bande. Jusqu'à mention du contraire, j'étudierai un Hamiltonien à une bande en ne considérant que les sites de cuivre. Je suppose pour le moment qu'il existe des termes de sauts entre les sites de cuivre directement (t_{ij}) et que seuls les électrons sur un même site de cuivre subissent la répulsion coulombienne, tel que le système puisse être décrit par :

$$H = \sum_{i,\sigma} \epsilon_d c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{\langle j,j' \rangle \sigma} t_{jj'} c_{j\sigma}^\dagger c_{j'\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d. \quad (2.1)$$

Je montrerai dans la suite comment adapter cette méthode au modèle à trois bandes.

Le modèle

Ce modèle considère une maille élémentaire du réseau comme une impureté. Cette impureté est couplée à un bain d'électrons extérieurs qui peuvent sauter sur l'impureté et interagir avec les électrons sur l'impureté selon un certain Hamiltonien que je nommerai H_{hyb} . Dans cette lignée, je considère que le bain d'électrons est non interagissant, que les interactions entre électrons ne sont possibles que sur l'impureté. La partie interaction du bain sera en fait contenue dans sa fonction d'hybridation et proviendra des interactions sur l'impureté. Cette approximation n'est en réalité exacte que pour une coordinence infinie, c'est-à-dire un nombre de sites infinis tous reliés les uns aux autres. Ce n'est pas possible en réalité bien sûr. En pratique, l'extension de cette théorie à de plus grosses impuretés permet de prédire la plupart des phases des cuprates supraconducteurs malgré la faible coordinence du système. En termes d'opérateurs, il va falloir créer un nouveau Hamiltonien qui s'obtient à partir de celui sur le réseau en retirant le terme d'interaction en dehors de l'impureté. En nommant alors le site de l'impureté le site 0 et en réorganisant les termes du Hamiltonien H selon s'ils comportent des sauts au sein de l'impureté, au sein du bain, ou bien entre les deux, j'obtiens :

$$H_{\text{imp}} = \overbrace{\sum_{\sigma} \epsilon_d c_{0\sigma}^\dagger c_{0\sigma} + U n_{0\uparrow}^d n_{0\downarrow}^d}^{\text{Partie locale}} + \overbrace{\sum_{\langle j,j' \rangle \sigma} t_{jj'} c_{j\sigma}^\dagger c_{j'\sigma}}^{\text{Partie du bain}} + \overbrace{\sum_{\langle 0,j \rangle \sigma} (t_{0j} c_{0\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t_{j0}^* c_{j\sigma}^\dagger c_{0\sigma})}^{\text{Partie d'hybridation}} \quad (2.2)$$

$$= \overbrace{\sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{0\uparrow}^d n_{0\downarrow}^d}^{\text{Partie locale}} + \overbrace{\sum_{\langle j,j' \rangle \sigma} t_{jj'} c_{j\sigma}^\dagger c_{j'\sigma}}^{\text{Partie du bain}} + \overbrace{\sum_{\langle 0,j \rangle \sigma} (t_{0j} d_{\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t_{j0}^* c_{j\sigma}^\dagger d_{\sigma})}^{\text{Partie d'hybridation}} \quad (2.3)$$

$$\equiv H_{\text{loc}} + H_{\text{bain}} + H_{\text{hyb}} \quad (2.4)$$

où en (2.3) j'ai décidé de renommer c_0 et c_0^\dagger en d et d^\dagger . Les d, d^\dagger sont alors les opérateurs sur l'impureté et c, c^\dagger les opérateurs pour le bain d'électrons.

J'ai ici posé les bases en ce qui concerne le Hamiltonien de la projection du problème sur une impureté. Il faut maintenant introduire un nouvel outil pour permettre de passer de la résolution de ce système sur l'impureté à la solution sur le réseau en entier. Cela me permettra de définir correctement ce que je veux dire par *trouver une solution à un Hamiltonien*.

La fonction de Green

La fonction de Green est un outil qui permet de décrire le comportement d'un système sous l'action d'un certain Hamiltonien. Elle peut notamment décrire les propriétés de l'impureté dont je parle un peu plus haut. C'est en réalité une fonction de corrélation et elle est définie par $G^R(i, j, t) = -i \langle \{d_{i,\sigma}(t), d_{j,\sigma}^\dagger\} \rangle \Theta(t)$. Dans cette expression, i et j sont des sites atomiques du système, qui en réalité sont plutôt des vecteurs de position correspondants à ces sites, t est le temps, $\{\dots, \dots\}$ l'opérateur d'anti-commutation¹ et Θ la fonction de Heaviside². Mais à quoi correspond cette définition ?

Je prends alors un temps t positif et je regarde le premier terme, à savoir $\langle d_{i,\sigma}(t) d_{j,\sigma}^\dagger \rangle$. Ce terme représente le comportement du système lorsqu'on y introduit un électron à l'instant $t = 0$ et que l'on essaye de l'en retirer à l'instant t . Cette fonction donne donc des informations sur la dynamique du système d'un point de vue extérieur. Le deuxième terme peut être vu, de la même façon, comme la propagation d'un trou³ dans le matériau. La fonction de Green est normalement calculée sur le cristal au complet et elle contient alors toutes les informations sur les excitations à une particule du système. De plus, grâce à l'invariance par translation du système, elle ne dépend que de la différence entre les indices i et j . G dépend alors d'une différence de position et d'un temps⁴. On considère très souvent la transformée de Fourier de cette fonction dans les deux espaces. En effet, comme le dit souvent le professeur Tremblay dans son cours sur le problème à N-corps, «en mécanique quantique, il faut sommer sur tous les états intermédiaires». Cela implique des convolutions entre les différentes quantités. Il est donc plus simple de travailler dans l'espace réciproque, une convolution devenant un simple produit. Je décompose cette double transformée de Fourier en plusieurs termes :

$$G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = G_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega) \quad (2.5)$$

$$G_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega + \mu - h_0(\mathbf{k}). \quad (2.6)$$

Dans ces expressions, j'ai introduit deux nouveaux symboles :

- G_0 , qui est la fonction de Green en l'absence d'interaction. Il s'agit de la fonction de Green du système lorsque U est nul. Son expression est très simple à obtenir et est équivalente à résoudre le problème sans interactions, car un tel système est totalement décrit par sa physique à une particule. Cela vient du fait que le Hamiltonien est dans ce cas là quadratique en opérateurs de création et annihilation. Sa partie imaginaire est notamment, à un facteur numérique près⁵, la densité d'états que je trace sur la figure 1.4.

1. $\{a, b\} = ab + ba$

2. nulle en $t < 0$ et égale à 1 en $t > 0$

3. On retire un électron à l'instant 0 et on regarde s'il est possible de le rajouter dans le système à l'instant t

4. Qui est en réalité également une différence de temps

5. La formule exacte fait en réalité intervenir $G_0^{-1}(\mathbf{k}, \omega + i\eta)$, avec η un petit réel positif

- $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ est une fonction qui s'appelle la **self-énergie**. On remarque que cette fonction quantifie la différence entre le problème sans interaction et le problème considéré. Comme G_0 est très facile à calculer, c'est donc le terme qui est difficile à obtenir dans la résolution du modèle. Encore, on remarque que $G^{-1}(\mathbf{k}, \omega) = \omega - [h_0(\mathbf{k}) - \mu + \Sigma(\mathbf{k}, \omega)]$. La partie entre crochets ressemble beaucoup au Hamiltonien grand canonique $H_0 - \mu N + V$. Il ne faut bien sûr pas oublier le facteur μN qui permet de contrôler N , justement et ainsi de changer la valeur du dopage.

En revenant à l'impureté ou plus précisément à un site au sein du cristal, la fonction de Green sur un site i dans le domaine des fréquences vaut⁶ :

$$G(i, i, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, \omega) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega + \mu - h_0(\mathbf{k}) - \Sigma(\mathbf{k}, \omega)} \quad (2.7)$$

et est bien sûr indépendante du site choisi. Il s'agit ici de la fonction de Green locale.

Rôle de l'impureté

Remarquez pour le moment que je n'ai fait aucune approximation sur la fonction de Green. J'ai simplement défini la fonction de Green dans le domaine des fréquences et des vecteurs d'onde. Il est temps maintenant de voir comment cette fonction va aider à la résolution.

Encore une fois, la partie difficile du problème est de trouver $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$. C'est elle qui porte l'effet des interactions sur le système. Le but étant de ramener le problème sur le réseau à un problème sur une impureté (c'est-à-dire un seul site), de la même manière que je me sépare des interactions au sein du bain, je vais devoir me séparer de la dépendance en coordonnées d'espace de la self-énergie car l'impureté est locale. La self-énergie existe alors uniquement sur l'impureté et est nulle dans tout le reste de l'espace. En effectuant la transformée de Fourier, cela veut dire que la self-énergie ne dépend pas de la variable \mathbf{k} ⁷. Il reste alors :

$$\Sigma(\mathbf{k}, \omega) = \Sigma(\omega). \quad (2.8)$$

Maintenant que j'ai défini les propriétés de l'impureté et comment relier la self-énergie à la fonction de Green du réseau sur un site, il me faut encore comprendre comment résoudre le modèle d'impureté d'Anderson.

Résolution du modèle d'impureté

Je cherche à projeter le problème du réseau infini sur l'impureté. Pour cela, il faut être en mesure de calculer la fonction de Green de l'impureté [26]. Celle-ci a la forme suivante :

$$G_{\text{imp}}^{-1}(\omega) = \omega + \mu - E_{\text{imp}} - \Sigma(\omega) - \Delta(\omega) \quad (2.9)$$

où E_{imp} est l'énergie de l'impureté et Δ est la fonction d'hybridation. Ces expressions ne dépendent pas d'un vecteur d'onde puisqu'il s'agit d'une équation locale sur un seul site. On peut comme précédemment relier la forme de cette fonction de Green à la forme du Hamiltonien (2.2). En effet, on remarque toujours le terme ω puis le Hamiltonien sans-interaction

6. on écrit seulement une transformée de Fourier ici

7. Rappelez vous qu'une transformée de Fourier sépare l'espace réel de l'espace des \mathbf{k}

8. On se rappelle que si une fonction est constante dans l'espace réciproque, sa transformée de Fourier dans l'espace réel est une fonction de Dirac donc très localisé.

sur l'impureté $E_{\text{imp}} - \mu$, puis la partie d'interaction - locale - sur l'impureté $\Sigma(\omega)$ et enfin la partie du bain et celle d'hybridation qui sont contenues dans $\Delta(\omega)$. Résoudre le problème sur l'impureté revient donc dans ce formalisme à trouver la fonction de Green $G_{\text{imp}}(\omega)$ à partir de la fonction d'hybridation $\Delta(\omega)$ décrivant le bain d'électrons et du Hamiltonien (2.2) sans connaître a priori $\Sigma(\omega)$.

Il y a plusieurs façons de résoudre ce modèle d'impureté selon les informations dont on a besoin et selon l'état que l'on souhaite étudier. Ici, j'ai étudié un solveur d'impureté appelée Monte-Carlo quantique en temps continu - CTQMC, pour *Continuous Time Quantum Monte-Carlo*. Cette méthode de résolution permet de calculer la fonction de Green à température non nulle, ce qui m'intéresse ici puisque je souhaite accéder à la température critique du système. J'ai pu avoir accès pendant ma maîtrise à des résultats à température nulle provenant de Sidhartha Dash qui utilisait, lui, une méthode appelée diagonalisation exacte qui permet d'accéder à l'état fondamental du système.

Monte-Carlo quantique en Temps Continu

Ce que l'on veut d'un solveur d'impureté à température non nulle c'est de calculer les moyennes thermodynamiques de la forme :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_E \mathcal{O}(E) e^{-\beta E} / Z \quad (2.10)$$

où \mathcal{O} est une observable quelconque - l'occupation ou une susceptibilité par exemple, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, avec T la température et Z est la fonction de partition :

$$Z = \sum_E e^{-\beta E}. \quad (2.11)$$

Dans mon cas et pour pouvoir résoudre le problème sur l'impureté⁹, j'ai surtout besoin de la fonction de Green qui est elle-même une moyenne thermodynamique, à savoir :

$$-i \left\langle \left\{ d_\sigma(t), d_\sigma^\dagger \right\} \right\rangle \Theta(t). \quad (2.12)$$

Le problème fondamental est donc le calcul d'une trace $\text{Tr}(\mathcal{O} e^{-\beta H})$ ¹⁰. Cependant, le calcul de la trace d'une exponentielle de matrice se trouve être très compliqué quand ladite matrice n'est pas diagonalisable simplement. Je vais donc complexifier un peu cette expression qui a l'air toute simple pour pouvoir la résoudre en utilisant une méthode Monte-Carlo, c'est-à-dire le calcul approché d'une intégrale. J'utilise ici le développement CT-HYB. Cela correspond à un développement selon le terme d'hybridation du bain avec l'impureté. Je vais encore une fois renommer les termes du Hamiltonien :

$$H = \overbrace{H_{\text{local}} + H_{\text{bain}}}^{H_0} + H_{\text{hyb}}. \quad (2.13)$$

Ce développement se trouve être adaptée au problème que je cherche à résoudre parce qu'il permet de passer dans la représentation segment - que j'introduis un peu plus tard - qui

9. On se rappelle que résoudre le problème sur l'impureté revient à calculer la fonction de Green de l'impureté en fonction de l'hybridation.

10. En effet, $\text{Tr}(\mathcal{O} e^{-\beta H}) = \sum_E \langle E | \mathcal{O} e^{-\beta H} | E \rangle = \sum_E \langle E | \mathcal{O} | E \rangle e^{-\beta E}$ où la somme sur E doit être comprise comme la somme sur tous les états propres de H

permet d'accélérer les calculs. Il permet également d'accéder à de plus basses températures, ce dont j'ai besoin pour pouvoir sonder la phase supraconductrice. De plus, il fonctionne mieux que les autres approximations - CT-INT ou CT-AUX que je ne décris pas ici, mais que vous trouverez en [28]¹¹ - pour de grandes valeurs de U .

Il faut alors effectuer un développement de l'exponentielle pour ramener le calcul de cette exponentielle compliquée à un calcul d'une intégrale en un grand nombre de dimensions :

$$Z \langle \mathcal{O} \rangle = Tr(\mathcal{O} e^{-\beta(H_0 + H_{\text{hyb}})}) \quad (2.14)$$

$$= Tr(\mathcal{O} \mathcal{T}_\tau e^{-\beta H_0} \exp[-\int_0^\beta d\tau H_{\text{hyb}}(\tau)]) \quad (2.15)$$

$$= \sum_k \frac{(-1)^k}{k!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_k Tr[\mathcal{O} e^{-\beta H_0} \mathcal{T}_\tau H_{\text{hyb}}(\tau_k) \dots H_{\text{hyb}}(\tau_1)] \quad (2.16)$$

où \mathcal{T} est l'opérateur d'ordonnancement dans le temps¹².

On remarque dans cette expression le facteur $(-1)^k$ devant les intégrales. Ce facteur est en fait une malédiction pour le calcul de cette intégrale, car il faut sommer des termes positifs et négatifs alternativement. Dans certaines conditions, cela a comme conséquence que la simulation a beaucoup de mal à converger et peut même ne pas converger dans des temps raisonnables¹³. Ce problème ne vient en réalité pas seulement de ce facteur $(-1)^k$, mais également des traces qui peuvent être négatives ou positives. L'idée reste cependant la même et on appelle ce phénomène le problème de signe.

Regardons cependant plus précisément comment obtenir l'équation 2.15 :

1. Pour N entier, j'écris :

$$-\beta(H_0 + H_{\text{hyb}}) = \sum_{n=1}^N -\frac{1}{N} \beta(H_0 + H_{\text{hyb}}) \quad (2.17)$$

$$\exp\left(\sum_{n=1}^N -\frac{1}{N} \beta(H_0 + H_{\text{hyb}})\right) = \prod_{n=1}^N e^{-\frac{1}{N} \beta(H_0 + H_{\text{hyb}})}. \quad (2.18)$$

C'est possible, car $-\frac{1}{N} \beta(H_0 + H_{\text{hyb}})$ commute avec lui-même.

2. J'utilise la formule de Baker–Campbell–Hausdorff qui dit qu'au premier ordre en $\frac{1}{N}$:

$$\exp\left(-\frac{\beta}{N}(H_0 + H_{\text{hyb}})\right) = \exp\left(-\frac{\beta H_0}{N}\right) \exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}}{N}\right). \quad (2.19)$$

3. Je me retrouve donc avec un produit de plusieurs termes $\exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}}{N}\right)$ entrecoupés de termes $\exp\left(-\frac{\beta H_0}{N}\right)$:

$$\exp\left(-\frac{\beta H_0}{N}\right) \exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}}{N}\right) \exp\left(-\frac{\beta H_0}{N}\right) \dots \exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}}{N}\right). \quad (2.20)$$

11. Vous trouverez d'ailleurs dans cet article beaucoup de précisions sur le CT-QMC. Il est très complet et va plus en profondeur là où je me restreins à un survol des concepts présentés

12. La définition de l'opérateur d'ordonnancement dans le temps pour des fermions est

$$\mathcal{T}_\tau A(\tau_x) B(\tau_y) = \begin{cases} A(\tau_x) B(\tau_y) & \text{si } \tau_x > \tau_y, \\ -B(\tau_y) A(\tau_x) & \text{si } \tau_x < \tau_y. \end{cases}$$

13. Un exemple simple de problème de ce type est la non-convergence de la série des $(-1)^n$

4. Je numérote ensuite les termes de type $\exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}}{N}\right)$ avec un indice k de 1 à N de droite à gauche. Puis je passe chaque terme dans la représentation d'interaction relative à H_0 ¹⁴ à un temps $\tau_k = (k-1)\frac{\beta}{N}$, $k \in \{1, \dots, N\}$. Pour le terme numéroté k , je fais la transformation :

$$H_{\text{hyb}}(\tau_k) = e^{\tau_k H_0} H_{\text{hyb}} e^{-\tau_k H_0} \quad (2.21)$$

$$\exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}}{N}\right) = e^{-\tau_k H_0} \exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}(\tau_k)}{N}\right) e^{\tau_k H_0}. \quad (2.22)$$

Vous remarquez qu'il ne s'agit pas exactement de la représentation d'interaction, car il n'y a pas de facteur i ¹⁵ devant les τ_k . Ce n'est pas une erreur. On appelle d'ailleurs habituellement les τ_k des *temps imaginaires*.

5. Je me trouve cette fois avec des termes du type $\exp\left(-\frac{\beta H_{\text{hyb}}(\tau_k)}{N}\right)$ entrecoupés de trois termes fonctions de H_0 :

$$\begin{aligned} e^{\tau_k H_0} \exp\left(-\frac{\beta H_0}{N}\right) e^{-\tau_{k-1} H_0} &= \exp\left(\frac{(k-1)\beta H_0}{N}\right) \\ &\exp\left(-\frac{\beta H_0}{N}\right) \exp\left(-\frac{(k-2)\beta H_0}{N}\right) = 1. \end{aligned} \quad (2.23)$$

6. Tous les termes intermédiaires disparaissent donc et il reste :

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{\beta H_0}{N}\right) \exp(-\tau_N H_0) \exp\left(-\frac{H_{\text{hyb}}(\tau_N)}{N}\right) \dots \exp\left(-\frac{H_{\text{hyb}}(\tau_1)}{N}\right) &= \\ \exp(-\beta H_0) \mathcal{T}_\tau \exp\left[-\int_0^\beta d\tau H_{\text{hyb}}(\tau)\right]. \end{aligned} \quad (2.24)$$

[28]

J'ai pu introduire l'opérateur d'ordonnancement dans le temps, car les τ_k sont rangés dans l'ordre décroissant dans (2.24). Il faut maintenant calculer une somme sur tous les entiers d'un produit d'intégrales dont le nombre de termes dépend de l'indice de sommation (2.16). Comme prévu, il s'agit là d'une intégrale plutôt compliquée et en beaucoup de dimensions. Cela peut être fait en utilisant un algorithme de type Monte-Carlo. Ce type d'algorithme permet de simuler une distribution de probabilité dont l'expression est trop compliquée à calculer directement. Il est par exemple utilisé dans la résolution numérique classique du problème d'Ising, qui parcourt l'espace de toutes les configurations possibles en utilisant l'algorithme de Metropolis-Hastings [29] et en mesurant les observables le long de ce parcours. Ici, la distribution que l'on essaye de simuler n'est pas exactement une distribution de probabilité mais peut contenir des poids négatifs. Pour pallier ce problème, il est nécessaire de se ramener

14. Pour rappel dans la représentation d'interaction relative à H_0 , pour chaque opérateur \mathcal{O} , on définit les opérateurs dépendants du temps $\mathcal{O}(t) = e^{itH_0/\hbar} \mathcal{O} e^{-itH_0/\hbar}$. On retrouve bien heureusement $\mathcal{O}(0) = \mathcal{O}$

15. Le nombre imaginaire

à une distribution de probabilité effective¹⁶ :

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\rho = \frac{\int \rho \mathcal{O}}{\int \rho} \quad (2.25)$$

$$= \frac{\int |\rho| \frac{\rho}{|\rho|} \mathcal{O}}{\int |\rho| \frac{\rho}{|\rho|}} \quad (2.26)$$

$$= \frac{\int |\rho| [\text{sign}(\rho) \mathcal{O}]}{\int |\rho| \text{sign}(\rho)} \quad (2.27)$$

$$= \frac{\int |\rho| [\text{sign}(\rho) \mathcal{O}] / \int |\rho|}{\int |\rho| \text{sign}(\rho) / \int |\rho|} \quad (2.28)$$

$$= \frac{\langle \text{sign}(\rho) \mathcal{O} \rangle_{|\rho|}}{\langle \text{sign}(\rho) \rangle_{|\rho|}}. \quad (2.29)$$

Ainsi, il suffit de calculer la moyenne de deux observables distribuées selon une distribution de probabilité avec des poids uniquement positifs, ce qui est possible avec l'algorithme de Metropolis-Hastings. On retrouve alors le problème de signe introduit un peu plus haut. Plus la moyenne du signe de ρ est proche de 0¹⁷, moins le résultat sera précis. Il faut donc que ce signe moyen ne soit pas trop petit pour pouvoir - dans un temps raisonnable - trouver une valeur assez précise de l'intégrale d'intérêt. Je décris CT-Seg-3B plus en détail dans la partie 2.2.3.

En réalité le Hamiltonien H_{hyb} est également un variable du problème car le bain n'a pas exactement les mêmes propriétés que le reste du réseau considéré comme non-interagissant comme avait été précisé dans l'équation (2.3). On écrit généralement :

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{j,\sigma} \left(V_j^\dagger d_\sigma^\dagger c_{j\sigma} + V_j^* c_{j\sigma}^\dagger d_\sigma \right) \quad (2.30)$$

avec les V_j des variables du problème. La fonction d'hybridation Δ n'est réellement qu'une fonction de ces variables et des paramètres du modèle. De plus, quelques manipulations de l'équation (2.16)¹⁹ permettent de se débarrasser des V_j et de n'exprimer l'intégrale qu'en fonction des paramètres microscopiques et de la fonction Δ . De cette façon, il est donc possible d'obtenir la fonction de Green sur l'amas G_{imp} uniquement en fonction de la fonction d'hybridation Δ .

2.1.2 Les équations d'autocohérence

Pour pouvoir projeter le problème sur l'impureté et en déduire une solution au problème, il faut pouvoir relier les deux fonctions de Green, celle sur l'impureté et celle sur le réseau entier - c'est le sens de *projeter* ici. On veut donc que l'équation :

$$\frac{1}{i\omega_n + \mu - E_{\text{imp}} - \Delta(i\omega_n) - \Sigma(i\omega_n)} = G_{\text{imp}}(i\omega_n) = G_{ii}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma(i\omega_n)} \quad (2.31)$$

16. Je fais ici des manipulations simples de l'expression de la valeur moyenne de \mathcal{O} sous la distribution ρ

17. C'est à dire plus le signe de ρ varie

18. Comme H_{hyb} est en réalité une variable du problème, la somme est potentiellement sur tous les sites j

19. Que je n'explique pas ici et que l'on retrouve dans la Ref. [28]

soit vérifiée. Attention, il ne faut pas oublier que dans ces expressions et à ce stade, tous les termes sont des matrices 2×2 , car il faut tenir compte du degré de liberté de spin²⁰. Les fractions écrites ici correspondent alors à des inversions de matrices. Cette équation est appelée la relation d'autocohérence, car c'est elle qui garantit que les deux solutions sont égales.

Dans cette expression, vous remarquez que j'ai remplacé ω par $i\omega_n$. Je remplace la fréquence réelle par une fréquence imaginaire. Cela vient du fait que pour pouvoir calculer des observables en utilisant un programme Monte-Carlo, il faut passer dans le domaine des temps imaginaires (2.1.1). L'espace des $i\omega_n$ que l'on nomme fréquences de Matsubara est alors l'espace réciproque de celui des temps imaginaires. Ces fréquences sont discrètes - et peuvent prendre les valeurs $i\omega_n = i\frac{2n+1}{\beta}\pi, n \in \mathbb{Z}$ - grâce à l'anti-périodicité de la fonction de Green en temps imaginaire.

2.1.3 Le cycle de DMFT

L'équation (2.31) et le solveur d'impureté forment un système d'équation que l'on doit résoudre. Il a été remarqué empiriquement qu'il suffit d'itérer le cycle d'équations pour pouvoir résoudre le système numériquement²¹. La vitesse de convergence n'est pas contrôlée, car les propriétés analytiques du système sont plutôt compliquées. Elle dépend fortement de la température, de la distance à une transition de phase, mais également du point de départ que l'on choisit pour le cycle. Je montrerai également que la vitesse de convergence dépend fortement de la précision du solveur d'impureté. Je discute de cela un peu plus bas (2.1.3). Le cycle d'autocohérence peut être représenté par l'algorithme suivant :

Résultat: La self-énergie de l'impureté

Initialisation: On choisit la self-énergie initiale $\Sigma_0(i\omega_n)$

On assigne: $m=0$

Tant que $\Sigma_{m-1}(i\omega_n) \neq \Sigma_m(i\omega_n)$ **faire**

Récupérer $G_{m,ii}$ pour le réseau en utilisant la partie droite de (2.31) puis la fonction d'hybridation $\Delta_m(\mathbf{k}, i\omega_n)$ pour le bain d'électrons avec la partie gauche ;

Résoudre le problème d'impureté pour récupérer la fonction de Green

$G_{m+1,imp}(i\omega_n)$;

Récupérer une nouvelle self-énergie $\Sigma_{m+1}(i\omega_n)$ en utilisant la partie gauche de (2.31) et $\Delta_m(\mathbf{k}, i\omega_n)$;

On assigne: $m=m+1$

fin

Algorithme 1: Le cycle d'autocohérence

En réalité, la condition de sortie de la boucle *tant que* n'est jamais exactement vérifiée à cause de l'erreur de la simulation Monte-Carlo notamment. On arrête donc le cycle d'autocohérence quand on ne voit plus d'amélioration à refaire le cycle une fois de plus, c'est-à-dire quand la self-énergie ne change pas beaucoup entre les itérations. Dans les faits, je suis, pour

20. Qui est essentiel pour pouvoir étudier la supraconductivité

21. On l'appelle le cycle d'autocohérence

chaque simulation, les observables qui m'intéressent - les différentes occupations et le paramètre d'ordre²² principalement - et j'arrête le cycle quand je vois que la moyenne mobile sur N_{moy} itérations ne varie plus. Je garde comme valeur finale de la self-énergie la moyenne sur les N_{moy} dernières itérations, car il y a une grande variation entre les itérations. Il est donc impossible de prendre une des self-énergie trouvées comme la bonne valeur convergée.

Ce nombre N_{moy} est nécessaire ici, car la plupart du temps, le système ne converge pas réellement, mais oscille autour d'une valeur d'équilibre. Ces oscillations sont principalement dues aux erreurs du calcul Monte-Carlo (et donc sont fortement liées à la valeur du signe), mais viennent également du fait qu'itérer le système ne suffit pas exactement à trouver le point fixe. Dans les cas extrêmes, la self-énergie oscille avec le nombre d'itérations autour d'une position que l'on suppose être la valeur d'équilibre. Il faut alors bien choisir N_{moy} pour s'affranchir de ces oscillations - en prenant donc N_{moy} grand devant la période de ces oscillations. Je discute de ce phénomène plus en détail en 4.4.

Initialisation

L'initialisation de l'algorithme est une partie très critique de l'algorithme, car la vitesse de convergence dépend grandement de la distance du point de départ à la solution.

Si l'on souhaite lancer CT-Seg-3B pour la première fois, une self-énergie nulle est souvent une bonne idée. Cependant, cette première simulation peut prendre beaucoup de temps avant de converger. Après cette première simulation, il est plus facile et plus rapide de varier doucement les paramètres du modèle et de réutiliser la self-énergie de sortie d'une simulation précédente. Dans certains cas en revanche, il n'est pas possible de partir d'une self-énergie nulle, car elle se situe trop loin de la solution et un problème de signe très fort apparaît (2.1.1) ce qui empêche complètement de calculer une nouvelle fonction d'hybridation par la relation d'autocohérence. Il est donc nécessaire de partir d'un endroit où le problème de signe est moins fort - par exemple avec une température plus haute - puis de se diriger petit à petit vers le régime de paramètre voulu. Il est toujours mieux - parce que plus rapide et évitant de trop gros problèmes de signe - de réutiliser les self-énergie convergées précédentes que de redémarrer de zéro à chaque fois.

Ensuite, comme je veux étudier l'état supraconducteur, je dois briser la symétrie de jauge en introduisant des corrélations entre électrons de spins up et down. Pour faire cela, je dois imposer une self-énergie *anormale* - terme hors diagonal représentant les corrélations entre spins ups et downs - non nulle au début de la simulation. En effet, au vu de la structure matricielle utilisée ici, les termes hors-diagonaux ne peuvent pas apparaître spontanément²³.

2.2 Le programme CT-Seg-3B

2.2.1 Introduction aux amas

Les atomes d'oxygène Je sais maintenant approcher la solution au modèle de Hubbard pour des cristaux très simples faits d'un seul atome par maille élémentaire. Comme je souhaite étudier les corrélations entre le dopage sur les sites d'oxygène et la supraconductivité, je dois

22. J'introduis cette quantité un peu plus tard en 3.1

23. Notamment parce que l'inverse d'une matrice diagonale par bloc est toujours diagonale par bloc

introduire des oxygènes dans la maille élémentaire. Il doit y avoir un total de 3 atomes par maille élémentaire.

Il est très simple d'introduire les oxygènes à la DMFT présentée précédemment. En effet, j'ai négligé les interactions sur les sites d'oxygène et entre les oxygènes et les cuivres dans le modèle. Il est donc possible de ne faire apparaître le rôle des oxygènes que dans la fonction d'hybridation. C'est-à-dire que l'impureté aura toujours effectivement un seul site, mais c'est la relation d'autocohérence qui introduira le rôle des oxygènes. Il faut alors changer la fonction de Green qui aura la forme d'une matrice 3×3 permettant d'étudier les corrélations entre les différents types d'atomes. La self-énergie aura donc aussi une forme 6×6 ²⁴, mais le fait de ne tenir compte que des interactions sur les sites de cuivre ($U_p = U_{pd} = 0$) donne la forme suivante à la self-énergie - dans la base $(d_{\uparrow}, p_{\uparrow}^x, p_{\uparrow}^y, d_{\downarrow}, p_{\downarrow}^x, p_{\downarrow}^y)$ ²⁵ :

$$\Sigma(i\omega_n) = \begin{pmatrix} \Sigma_d(i\omega_n)_{\uparrow\uparrow} & 0 & 0 & \Sigma_d(i\omega_n)_{\uparrow\downarrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Sigma_d(i\omega_n)_{\downarrow\uparrow} & 0 & 0 & -\overline{\Sigma_d(i\omega_n)_{\downarrow\downarrow}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

Pour les spins down, on retrouve un terme $-\overline{\Sigma_d(i\omega_n)_{\downarrow\downarrow}}$, où la barre supérieure indique la conjugaison complexe. Ce terme provient du passage dans la base de Nambu (voir 4.2).

En réalité, dans un tel système, en ne considérant comme impureté qu'une maille élémentaire, les termes hors diagonaux de cette équation - à savoir $\Sigma_d(i\omega_n)_{\uparrow\downarrow}$ et $\Sigma_d(i\omega_n)_{\downarrow\uparrow}$ - disparaissent²⁶. La supraconductivité n'est donc pas permise par un tel système. Il faut alors trouver un moyen de tout de même faire apparaître la supraconductivité dans ce modèle et cette méthode. C'est ce que je présente dans la prochaine partie.

Permettre la supraconductivité Il est temps maintenant d'introduire de la non-localité dans le but de permettre la supraconductivité. J'ai précédemment parlé de permettre des corrélations entre électrons de spins up et down mais cela ne suffit pas pour étudier la supraconductivité dans les cuprates qui a un caractère d qui est un phénomène non strictement local [30]. En effet, contrairement à une orbitale s pour laquelle la majorité du poids spectral se situe sur le site concerné - et pour laquelle, je n'aurais pas nécessairement besoin de considérer plus d'une maille élémentaire - une orbitale d (et plus particulièrement $d_{x^2-y^2}$) a la majorité de son poids à l'extérieur du site et selon les axes x et y . Je présente dans la figure 2.1 une visualisation de ces types d'orbitale. L'orbitale $d_{x^2-y^2}$ aura alors plutôt tendance à se coupler à ses voisins directs et introduit donc une certaine non-localité au problème.

La stricte localité de la DMFT venait du fait que je n'avais isolé qu'une maille élémentaire. Je choisis donc maintenant tout simplement d'isoler plus qu'une maille élémentaire en changeant l'impureté. Pour choisir cette nouvelle impureté, que j'appellerai amas, je vais devoir faire des choix. En effet, premièrement, il faut choisir la forme de l'amas. Je veux garder une certaine symétrie selon les axes x et y que m'indique la forme du réseau - car j'ai choisi un

24. Il y a 3 sites atomiques par maille élémentaire et deux spins par site

25. Les termes en \dagger viennent du fait que pour étudier la supraconductivité, je m'intéresse aux corrélations entre particules de spins opposés. Cela est permis par la représentation de Nambu que j'introduis en 4.2.

26. En pratique ces termes tendent vers 0 lorsqu'on effectue le cycle d'autocohérence.

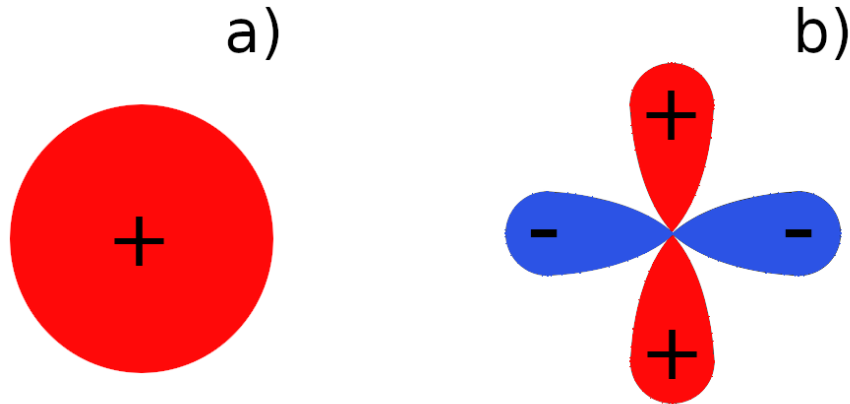


FIGURE 2.1 – Représentation des orbitales s (a) et $d_{x^2-y^2}$ (b). La supraconductivité de type s aura tendance à voir des corrélations purement locales tandis que la supraconductivité de type d présentera des corrélations entre sites voisins. Remarquez également les changements de signe suivant les directions pour l'orbitale d . On a bien une inversion du signe quand on tourne le système de $\frac{\pi}{2}$.

réseau carré en 1.2.2. Je choisis alors un amas carré pour cette raison. Ensuite, il faut savoir que plus le nombre de mailles élémentaires au sein de l'amas est grand, plus le programme CT-Seg-3B aura besoin de temps pour converger et plus le problème de signe sera grand. En effet, si on introduit plus de mailles élémentaires, on rajoute des possibilités de corrélations entre plus de sites et donc plus de termes dans les intégrales que je dois déterminer, ce qui veut dire beaucoup plus de temps de simulation. Ajouter plus de sites dans l'amas n'arrange pas non plus le problème de signe. Pour étudier la supraconductivité dans les cuprates, il me suffit en réalité de prendre 4 sites disposés en carré. J'aurais pu cependant prendre plus de sites dans l'amas, mais cette taille est la taille minimale requise pour pouvoir étudier la supraconductivité dans ce modèle.

L'impureté est donc constituée de 4 mailles élémentaires. Je le représente sur la figure 1.3b. Pour pouvoir étudier un tel système, il va falloir considérer son espace réciproque, qui est différent de l'espace réciproque quand l'impureté a une seule maille élémentaire. Je vais donc introduire une représentation appelée *représentation mixte*[31]. Cette représentation - qui est en réalité simplement un changement de base de calcul - consiste en une décomposition en des vecteurs du super-réseau $\tilde{\mathbf{k}}$ ²⁷ puis une décomposition selon les 4 sites de l'impureté. Cette représentation me permet d'introduire la nouvelle self-énergie sur l'amas, qui devient une matrice 24×24 (2 spins, 3 orbitales, 4 sites). Puis, comme précisé au-dessus, je ne tiens pas compte des termes d'interaction entre orbitales et sur les sites d'oxygène. J'ai donc seulement $8 \times 8 = 64$ ²⁸ termes non nuls dans la self-énergie sur l'amas.

Ensuite, pour éviter des instabilités numériques, faciliter la convergence des simulations

27. Il s'agit du même réseau réel que précédemment, mais dans lequel la maille élémentaire est l'amas que j'ai choisi. La zone de Brillouin sera donc nécessairement plus petite.

28. 2 spins, 4 sites.

Monte-Carlo et me concentrer uniquement sur la supraconductivité, je force les termes de la self-énergie à vérifier certaines relations.

- **Pour la partie normale**, je veux supprimer la possibilité d'un état antiferromagnétique pour me concentrer uniquement sur l'état supraconducteur. En effet, j'ai montré, au moment de discuter du diagramme de phase, que la phase antiferromagnétique pouvait empêcher l'apparition de la phase supraconductrice. Je force donc sur l'amas et pour la partie normale une symétrie par rotation de $\frac{\pi}{2}$ ainsi qu'une symétrie entre les axes x et y . De plus, je force une symétrie de spin, à savoir qu'un échange des spins ne modifie pas le comportement du système.
- **Pour la partie anormale**, c'est-à-dire pour les corrélations entre les spins ups et downs, je force une symétrie de type $d_{x^2-y^2}$. Les corrélations ne sont donc possibles qu'entre sites premiers voisins et sont antisymétriques pour une rotation de $\frac{\pi}{2}$ de l'amas.

On voit donc que les symétries du problème sont très différentes pour la partie normale et anormale. De plus, l'impossibilité de l'apparition d'une phase antiferromagnétique éloignera les résultats du diagramme de phase des cuprates. Un effet notable de ce choix est la persistance de la phase supraconductrice proche du demi-remplissage. Je pourrais cependant corriger cette approximation a posteriori, notamment en tenant compte de la cohérence de phase supraconductrice dans la section 3.2.2.

2.2.2 La représentation segment

En 2.1.1, j'ai introduit très rapidement le but du Monte-Carlo quantique en temps continu. Cet algorithme nécessite généralement des temps de calcul très longs parce qu'il y a besoin de faire des multiplications de très grandes matrices à chaque étape de la simulation - $\langle \mathcal{O} \rangle = \text{Tr}(\rho \mathcal{O})$ [27]. De plus, en agrandissant l'impureté, on augmente très fortement le temps de calcul. Ce ralentissement est d'autant plus fort près de la frontière supraconductrice ainsi que près du demi-remplissage²⁹. Comme je dois réaliser environ 70 à 100 résolutions d'un problème Monte-Carlo, si j'utilise la forme matricielle pour résoudre le problème, obtenir un point sur le diagramme de phase pourrait prendre des semaines entières. Ce n'est bien sûr pas raisonnable. Cependant, remarquez que les nombres d'occupation sur les sites de l'amas commutent avec la partie locale - sur l'amas - du Hamiltonien. En effet, en utilisant l'équation (2.3) et en se souvenant qu'il y a maintenant quatre sites sur l'impureté, on a :

$$H_{\text{loc}} = U \left(n_{0\uparrow}^d n_{0\downarrow}^d + n_{1\uparrow}^d n_{1\downarrow}^d + n_{2\uparrow}^d n_{2\downarrow}^d + n_{3\uparrow}^d n_{3\downarrow}^d \right). \quad (2.33)$$

Ce Hamiltonien est donc bien diagonal dans la base des nombres d'occupation des différents sites et spins. La référence [28] indique qu'il est possible dans ce cas d'utiliser la représentation segment. Cette représentation consiste à séparer les types d'orbitales en les considérant indépendamment, ce qui est rendu possible par le développement présenté en (2.16). En effet, il ne nécessite qu'une évolution seulement selon $H_{\text{loc}} + H_{\text{bain}}$, ce qui découple alors les états sur l'amas et dans le bain. Cette façon de calculer la trace en (2.16) permet alors d'éviter de gros produits matriciels et accélère le calcul. La principale raison qui permet cette commutation est le fait qu'il n'y a pas de saut direct entre atomes de cuivres. Les sauts entre orbitales n'apparaissent qu'à travers les oxygènes qui - car non interagissant - sont inclus dans la partie sans interactions au travers du terme $\epsilon(\mathbf{k})$ dans l'équation (2.31).

29. En réalité proche d'une transition de phase

Cette représentation est illustrée dans la figure 2.2³⁰. Pour pouvoir la comprendre, il faut se rappeler ce que j'essaye de calculer en (2.16). Si je prends un terme de la somme, disons le terme à l'indice k , il faut calculer une intégrale en k dimensions. Un terme de cette intégrale ressemble alors à : $\text{Tr}[\mathcal{O}e^{-\beta H_0} \mathcal{T}_\tau H_{\text{hyb}}(\tau_k) \dots H_{\text{hyb}}(\tau_1)]$. Il s'agit de la trace d'un produit de Hamiltonien à des temps différents. Pour obtenir un terme non nul dans cette trace, par la remarque précédente, il est nécessaire que $H_{\text{hyb}}(\tau_k) \dots H_{\text{hyb}}(\tau_1)$ conserve le nombre de particules sur chaque site de l'impureté. Or, l'hamiltonien d'hybridation prend la forme :

$$H_{\text{hyb}} = \sum_{j,\sigma} (V_j d_\sigma^\dagger c_{j\sigma} + V_j^* c_{j\sigma}^\dagger d_\sigma) = \tilde{H}_{\text{hyb}}^\dagger + \tilde{H}_{\text{hyb}}. \quad (2.34)$$

On voit dans cette expression que le terme $\tilde{H}_{\text{hyb}}^\dagger$ crée un électron sur l'amas, alors que le terme \tilde{H}_{hyb} détruit un électron sur cet amas. Les seuls termes qui conservent le nombre d'électrons sur chaque site de l'amas et auront une contribution non nulle à la trace devront donc comprendre un nombre pair d'opérateurs de création et d'annihilation sur chaque site. Pour alléger les notations et simplifier la compréhension, je ne considère qu'un site dans la suite. Ce que je dis est cependant valable pour chaque site dans la méthode réelle. La seule différence sera que les \tilde{H}_{hyb} sur différents sites sont mélangés les uns aux autres.

Un tel terme ressemblera alors à :

$$\mathcal{T}_\tau \tilde{H}_{\text{hyb}}(\tau_k) \tilde{H}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau'_k) \dots \tilde{H}_{\text{hyb}}(\tau_1) \tilde{H}_{\text{hyb}}^\dagger(\tau'_1). \quad (2.35)$$

De plus, les termes dont les temps ne sont pas ordonnés comme :

$$\tau_k > \tau'_k > \tau_{k-1} > \tau'_{k-1} > \dots > \tau_1 > \tau'_1 \quad (2.36)$$

c'est-à-dire avec les temps sans et avec primes alternés, auront une trace nulle parce qu'ils auraient violé le principe de Pauli (il n'est pas possible de créer ou de détruire deux fois de suite un électron sur le même site). On peut donc regrouper les opérateurs 2 par 2 et supposer qu'entre les temps τ_j et τ'_j , l'impureté contient un électron alors qu'entre τ'_j et τ_{j-1} il n'y en a pas. Alors bien sûr, on parle de temps imaginaire donc les électrons ne sautent pas sur l'impureté à un temps τ_j mais il est possible de se le représenter de cette façon. Chaque site aura alors son propre graphe comme sur la figure 2.2 et les évolutions, bien que liées par les opérateurs sur le bain peuvent se faire indépendamment.

En utilisant cette représentation, il est possible de calculer plusieurs observables très facilement comme on peut le voir sur le graphe. Les deux lignes de temps représentent un site simple avec des spins opposés. Prenons un exemple : au temps $\tau_{1\uparrow}^s$ en bleu, un électron de spin up arrive sur le site. Puis il revient dans le bain au temps $\tau_{1\uparrow}^e$ en rouge. Pendant une partie du temps qu'il reste sur le site, il interagit avec un électron de spin down - jusque $\tau_{3\downarrow}^e$ et contribue donc d'une énergie U à l'énergie du système.

Comme il y a 4 sites dans l'amas ainsi que 2 spins possibles par site, j'ai besoin d'un total de 8 lignes de temps pour la simulation. Il faut bien sûr séparer les spins dans ce modèle pour pouvoir étudier la création de paires de Cooper. Dans une simulation usuelle et dans les domaines de paramètres que j'utilise - $\beta = 60$ -, il y a entre 35 et 50 segments par ligne de temps³¹. On peut se convaincre facilement également que le nombre moyen

30. Cette figure est extraite de la référence [28] directement

31. Ce chiffre dépend bien sûr fortement de la température et correspond à un total de 300 à 400 segments au total

d'opérateurs est aussi une observable que l'on peut relier à l'énergie cinétique sur l'amas [32]. En effet, intuitivement, plus il y a d'opérateurs, plus les électrons rentrent et sortent de l'amas fréquemment donc plus ils ont tendance à se déplacer.

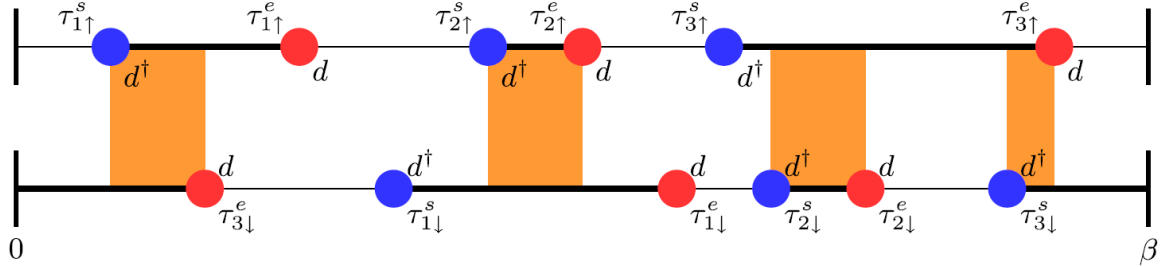


FIGURE 2.2 – La représentation segment pour un seul site. La ligne du haut correspond aux spins up alors que la ligne du bas correspondant aux spins down. Les points bleus correspondent aux opérateurs de création et les points rouges aux opérateurs de destruction sur le site. Les zones en gris sont appelés les *segments*. Ils représentent un site occupé entre les points bleu et rouge qui le délimitent. Les zones en orange représentent les sites doublement occupés (pour lesquels deux électrons sont présents sur un même site). On a des conditions anti-périodiques sur le segment. Seule la périodicité est visible ici sur le segment 3_{\downarrow} , l'anti-périodicité contribue d'un signe $-$ quand un segment traverse le point $\tau = \beta$.

2.2.3 Fonctionnement de la simulation Monte-Carlo

Idée générale

J'ai dit auparavant qu'une simulation Monte-Carlo permettait le calcul de l'expression (2.14). Je vais résumer ici le fonctionnement de cet algorithme et introduire plusieurs termes permettant la compréhension du reste de ce mémoire.

Comme il est impossible d'évaluer cette somme et cette intégrale directement par un calcul du fait de la taille de l'espace sur lequel je veux sommer et intégrer, il me faut une approximation. Le programme CT-Seg-3B fait exactement cela en utilisant une chaîne de Markov pour pouvoir savoir quels termes doivent être intégrés au résultat. Le principe est le suivant :

- Je choisis un point de départ dans l'espace des configurations de segment, disons pour fixer les idées, le point avec aucun opérateur sur les lignes de temps. Le but est de se déplacer dans cet espace des configurations intelligemment pour récolter les termes les plus importants, qui contribueront le plus à l'intégrale et en tenir compte.
- Pour se déplacer à partir d'un point quelconque, je propose un petit changement à la configuration actuelle, par exemple d'ajouter un segment sur le site 3 avec un spin down entre les temps $\tau_{1\downarrow}^s$ et $\tau_{1\downarrow}^e$. Cette procédure s'appelle un pas. J'accepte ensuite cette proposition avec une probabilité connue qui dépend de la différence entre les deux configurations. Je dis différence ici parce que la formule est un peu compliquée, mais

pour simplifier, vous pouvez vous imaginer que la probabilité dépend de la différence en énergie entre les deux configurations³². Si la proposition n'est pas acceptée, on réessaye une autre proposition. Si elle est acceptée, on met à jour la configuration du système et on recommence[28]³³. Je viens alors de réaliser ce que l'on appelle une mise à jour de la chaîne de Markov³⁴.

- En général l'opération d'un pas est locale - ici j'ai ajouté un segment seulement - ce qui n'éloigne pas beaucoup la nouvelle configuration de l'ancienne. Cependant, au bout d'un certain nombre de pas³⁵, je peux supposer que la configuration dans laquelle je me trouve est décorrélée de la précédente. J'enregistre alors les observables que je veux conserver - au moins la fonction de Green pour pouvoir continuer le cycle d'autocohérence. Cette procédure est appelée une mesure. Le principe de la simulation Monte-Carlo est de pouvoir effectuer des mesures décorrélées d'observables au sein de l'espace d'intégration. Il est donc très important de ne pas mesurer trop souvent l'état du système. Sans ça, la simulation devra durer beaucoup plus longtemps, car j'amasserais des données redondantes qui ne m'apprennent rien sur le système en lui-même.

La simulation Monte-Carlo consiste à amasser les mesures des observables et ensuite de moyenner sur toutes ces observations pour obtenir les valeurs des observables recherchées. Il me faut donc assez de mesures pour avoir une moyenne finale fiable. Cependant, faire plus de mesures demande plus de temps de calcul, surtout si on souhaite décorréler les mesures. Il faut donc trouver un juste milieu entre le nombre de mesures que l'on fait et la corrélation entre ces mesures. Généralement, je fais quelques dizaines de pas entre chaque mesure. Cependant même en faisant cela les mesures restent très corrélées et il faudra faire un traitement plus tard pour encore décorréler les mesures et pouvoir accéder à l'erreur réelle sur le résultat (voir 4.1.1).

Ergodicité et autres propriétés

J'ai présenté les opérations principales qui sont faites pendant une simulation Monte-Carlo. Cependant, pour que le programme CT-Seg-3B fonctionne correctement, donne des résultats précis et cela dans un temps raisonnable, il est nécessaire qu'il vérifie d'autres propriétés :

- Calculer les probabilités de passage d'un état à un autre doit être rapide. Cela implique que la différence entre les états ne doit pas être trop grande et que le type de mise à jour doit être connu a priori. On restreint généralement les types de mises à jour à un petit nombre. Le fait d'utiliser des mises à jour locales³⁶ permet également un plus grand taux d'acceptation p , ce qui est primordial pour leur acceptation. Cela permet donc de ne pas perdre du temps de simulation à proposer des mises à jour constamment rejetées.
- Il doit être possible de passer de n'importe quel point à un autre en utilisant uniquement

32. Ce qui est exactement le cas pour une simulation Monte-Carlo pour le modèle d'Ising par exemple

33. Vous trouverez notamment les détails du calcul de la probabilité d'acceptation dans cet article

34. appelé Sweep dans le programme CT-Seg-3B

35. Qui doit être déterminé empiriquement

36. Avec une faible différence entre les états de départ et d'arrivée

les types de mises à jour sélectionnés. Ce passage doit également pouvoir être possible en un temps raisonnable. Si une chaîne de Markov a cette propriété, on dit qu'elle est *ergodique*.

Dans mon cas comme dans la plupart des simulations Monte-Carlo, j'ai sélectionné seulement deux types de mise à jour :

- La première consiste à insérer un nouveau segment sur un certain site avec un certain spin, comme décrit plus haut.
- La deuxième consiste à retirer un des segments que l'on avait ajouté précédemment.

Comme tout état que l'on considère peut se représenter comme une collection de lignes de temps (Fig. 2.2), il est effectivement toujours possible de passer d'un état à l'autre en utilisant uniquement ces deux opérations. Pour me convaincre de cela, en partant d'une configuration quelconque, en enlevant tous les segments et en rajoutant tous les segments présents dans la configuration cible, je peux effectivement passer d'un état à l'autre. Le principe de cet algorithme est alors de parcourir la partie de l'espace sur lequel on intègre qui participe le plus à l'intégrale - c'est-à-dire l'espace sur lequel la densité de probabilité est la plus grande. Cependant, en opérant uniquement par petits pas, il est possible que l'algorithme se trouve bloqué dans une région de l'espace. Pour illustrer ce problème, tournez-vous vers la figure 2.3.

Si je souhaite connaître la position moyenne de repos d'une particule dans ce potentiel, je commence par choisir une position de départ. Ensuite, je fais évoluer ma particule selon l'algorithme présenté précédemment. Pour ce faire, avec une certaine probabilité, il est possible pour la particule de changer de place dans l'espace en suivant une loi qui dépend de sa position dans le potentiel. Si la simulation démarre en $x = -1$, on voit qu'elle va difficilement passer dans le puits vert³⁷. La moyenne reportée sera donc $\langle x \rangle = -1$. Si je mets la particule initialement dans le puits vert, je trouverai alors $\langle x \rangle = 1$. Le résultat de la simulation sera donc erroné dans les deux cas puisque la valeur moyenne de la position d'équilibre est clairement $\langle x \rangle = 0$ ici.

Pour résoudre ce problème, il suffit de proposer des mises à jour non locales. Par exemple dans l'exemple avec la balle, je pourrai de temps en temps proposer de multiplier par -1 la position de la particule. Remarquez que cette mise à jour qui ne change pas l'énergie du système a beaucoup des chances d'être acceptée. De cette façon, le programme ne reste pas coincé dans un minimum local et peut effectivement sonder tout l'espace des solutions.

Dans CT-Seg-3B, il existe plusieurs façons de réaliser cette opération. La première consiste à échanger les spins de tous les segments dans une certaine configuration. La deuxième consiste à échanger les lignes de temps de deux sites différents. Ces deux opérations sont appelées des opérations de flip. Ces opérations sont cependant coûteuses en temps. En effet, changer tous les opérateurs sur un site nécessite de modifier en conséquence les opérateurs sur le bain. Cela implique le calcul d'un inverse d'une grande matrice pour les opérateurs sur le bain, chose que je mentionne dans la partie suivante.

37. Quand je dis difficilement ici, c'est qu'en théorie un passage du puits orange au puits vert est possible, mais qu'un temps très long sera nécessaire à la simulation pour effectuer cette opération.

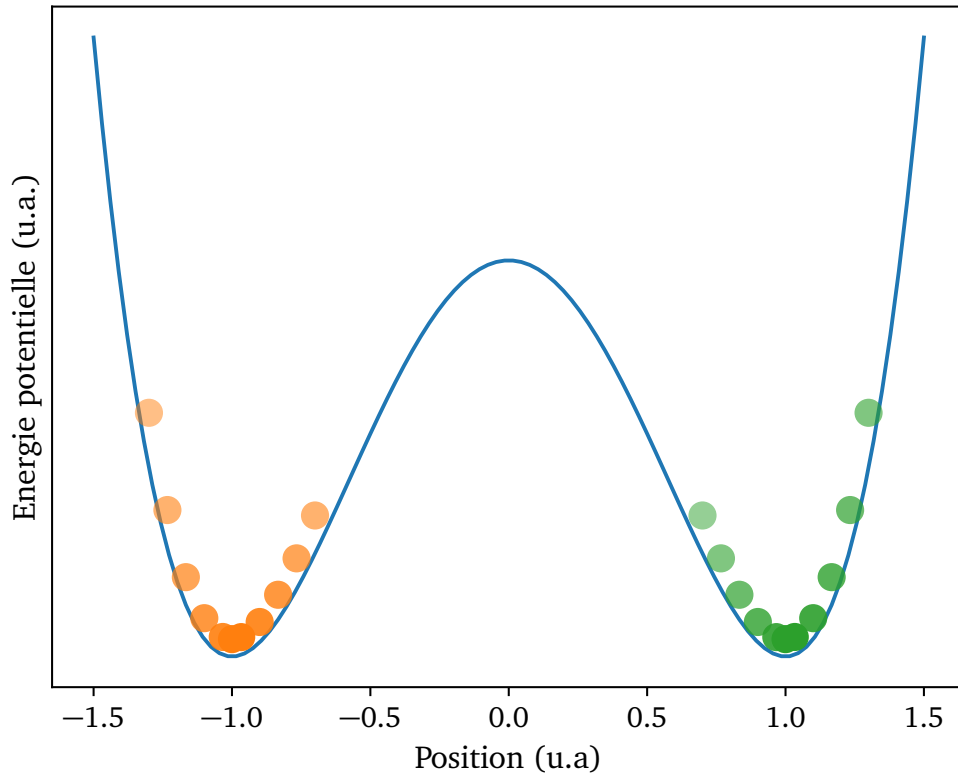


FIGURE 2.3 – Schéma permettant la compréhension de la nécessité des mises à jour non locales. Les deux puits du potentiel présentent des états d'équilibre stable dont il est difficile de sortir par des opérations locales sur la balle. On peut s'en convaincre en imaginant que la particule est une balle très lourde et que la pousser d'un puits à l'autre est difficile. Pour permettre le passage d'un puits à l'autre, il vaut mieux utiliser une grue que de lui donner une petite poussée.

Erreurs numériques Pour chaque site et pour chaque spin, un terme de la somme (2.16) peut se résumer à un produit entre un terme sur l'impureté et un terme sur le bain d'électrons³⁸. Le terme sur le bain d'électrons peut en réalité se réécrire comme le déterminant d'une matrice de taille le nombre de segments sur la ligne de temps³⁹. Comme le déterminant d'une grande matrice prend du temps à calculer, le déterminant après une mise à jour est obtenu à partir de celui au point précédent en utilisant la formule de Shermann-Morrisson [33] qui permet de passer de l'inverse d'une matrice à celui d'une autre matrice proche. Au bout d'un certain nombre de mises à jour cependant, à cause des erreurs numériques, le déterminant peut ne plus être correct et s'éloigner de sa valeur réelle. Il faut dans ce cas le recalculer à partir de zéro pour s'assurer que cette déviation n'est pas trop grande. Comme cette opération est très coûteuse, elle n'est faite qu'une fois de temps en temps. On appelle cette opération une

38. voir la forme de l'élément \tilde{H}_{hyb}

39. Procédure qui d'ailleurs permet de diminuer le problème de signe

mise à jour propre (*Clean Update*). Il peut cependant être opportun de faire les opérations de *flips* juste avant les mise-à-jours propres pour ne pas recalculer toute la matrice trop souvent. Cela est cependant compliqué à mettre en place si on considère que les mises à jour propres sont faites régulièrement et que les flips sont faits selon une probabilité. De plus, une difficulté supplémentaire survient si les deux événements ne sont pas faits à des temps multiples l'un de l'autre. Je n'ai donc pas implémenté la synchronisation des mises à jour propres et des flips.

Thermalisation Cette dernière partie est en réalité la première chose qui est faite dans une simulation Monte-Carlo. Cette étape est primordiale pour que le calcul se passe dans de bonnes conditions. Elle consiste en une série de mises à jour sans mesures à l'initialisation pour se positionner dans une région de l'espace plus propice à la simulation de la distribution de probabilité. Plus précisément, le but d'une telle opération est d'atteindre un régime dans lequel la condition de balance détaillée de la distribution de probabilité est satisfaite :

$$\frac{P(x \rightarrow y)}{P(y \rightarrow x)} = \frac{p(y)}{p(x)}. \quad (2.37)$$

Ici, $P(x \rightarrow y)$ est la probabilité de passer de la configuration x à la configuration y avec des mises à jour et $p(x)$ est la densité de probabilité que l'on souhaite simuler avec la simulation Monte-Carlo. Cette procédure de thermalisation est donc une façon de décorréler la simulation de son point de départ qui est arbitraire et qui ne devrait pas rentrer en compte dans la simulation. En réalité, chaque simulation ne commence pas de zéro, car CT-Seg-3B enregistre à la fin de la simulation l'état des segments dans un fichier qui peut être réutilisé pour l'initialisation d'une future simulation. La thermalisation est tout de même réalisée par-dessus cet état initial notamment pour pouvoir décorréler les résultats de simulations simultanées sur plusieurs processeurs qui auraient sans cela le même point de départ.

Choix des paramètres Il n'existe pas de stratégie universelle pour choisir ces différents paramètres du programme, à savoir le nombre de pas nécessaire à la thermalisation, avant une mesure, un flip de spins, un changement de site, une mise à jour propre. Il faut trouver ces paramètres empiriquement en testant le programme. En effet, comme précisé au dessus, le choix de ces paramètres se fait toujours en faisant des compromis entre temps de calcul et précision des résultats. Chaque simulation devrait alors faire l'objet d'une étude pour déterminer les paramètres adéquats. En pratique, c'est la température et la proximité à une transition de phase qui jouent le rôle le plus important dans la détermination des paramètres. Dans cette optique, j'ai choisi des paramètres qui permettent à une simulation proche du demi-remplissage - là où le problème de signe est le plus grand - de converger correctement.

Enfin, je vais me concentrer plus précisément sur le nombre de mesures nécessaires pour atteindre une convergence, qui fait partie des ces paramètres que je dois choisir. Usuellement dans ce type de simulation demandant un grand nombre de pas Monte-Carlo, on ne choisit pas le nombre de mesure - ou de pas - que le programme doit faire mais plutôt le temps au bout duquel il s'arrête. Ce choix est fait notamment en raison de la parallélisation qui est effectuée. Cette parallélisation est très simple et consiste uniquement à faire des simulations indépendantes simultanément puis de faire la moyenne de ces simulations pour obtenir le résultat escompté. Comme il s'agit de simulations décorrélées, si je demande à chaque processeur de s'arrêter au bout d'un certain nombre de mesures, il est très probable qu'un des

processeurs s'arrête avant les autres et attende que les autres le rattrapent. C'est donc du temps de processeur perdu. La limite de temps permet d'éviter ce problème. Je choisis un temps d'environ 30 à 40 minutes pour chaque simulation Monte-Carlo.

Cette parallélisation est faite notamment pour accélérer artificiellement les calculs car au lieu d'attendre d'avoir le bon nombre de mesures sur une simulation pour obtenir un résultat convergé, réaliser plusieurs simulations indépendantes dont la somme des durées est la durée nécessaire à avoir une convergence dans le cas avec une seule simulation. De plus, cela permet d'avoir des résultats décorrélés entre les simulations ce qui améliore la précision des résultats finaux. Cette décorrélation est notamment assurée par l'étape de thermalisation faite sur chaque processus indépendamment. J'ai donc habituellement 96⁴⁰ simulations qui tournent en même temps sur 96 processeurs différents. Vous pourrez trouver en annexe plus d'informations sur le choix de ces paramètres (4.4) et sur le calcul de l'erreur des simulations (4.1.1).

Résumé de l'algorithme Monte-Carlo Si tout ce qui a été dit précédemment est encore un peu obscur pour vous, je propose l'algorithme 2 qui résume le fonctionnement d'une simulation Monte-Carlo pour résoudre le problème d'impureté dans le développement en hybridation.

2.3 Phases et paramètres d'ordre

Dans la partie précédente, j'ai montré comment obtenir la self-énergie sur l'amas. De plus, j'ai discuté des symétries choisies dans le programme pour permettre l'apparition de la phase supraconductrice et interdire la phase antiferromagnétique. Je vais discuter plus en détail ici de la forme de la self-énergie pour mieux comprendre comment ces symétries l'influencent. Ensuite, je montrerai comment il est possible de modifier ces symétries pour permettre la phase antiferromagnétique. Dans le cas général, en ne tenant compte que des interactions sur les sites de cuivre, la self-énergie est une matrice 8×8 avec une représentation par bloc 2×2 :

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{N\uparrow} & \Sigma_A \\ \Sigma_A & -\Sigma_{N\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

Les dépendances en $i\omega_n$ sont implicites ici et dans le reste de cette partie. L'opposé du conjugué qui apparaît pour la self-énergie entre spins down vient du fait que je suis passé dans l'espace de Nambu (voir 4.2).

Dans cette représentation, je sépare la partie normale Σ_N de la partie anormale Σ_A comme indiqué en 2.2.1. Pour imposer des symétries, il faut les imposer à la fois sur la self-énergie, sur la fonction d'hybridation et sur la fonction de Green. C'est pourquoi les structures de self-énergie que je décris ici sont en réalité communes à ces trois matrices.

40. encore un paramètre

41. Ou plutôt des formes calculées analytiquement à partir de cette équation (2.16). Ces formes, plus simples, peuvent, dans certains cas, être exprimées en fonction de la configuration de segments actuelle. C'est le cas pour l'occupation et le spin par exemple.

Entrée: La fonction d'hybridation Δ

Résultat: La fonction de Green sur l'impureté G_{imp} et d'autres observables

Initialisation: La configuration de segment à partir d'une ancienne configuration.
Sinon, commencer avec des lignes de temps vides.

Tant que le temps de thermalisation n'est pas atteint **faire**

 FaireUnPas()

fin

Tant que le temps de simulation n'est pas atteint **faire**

 FaireUnPas()

Si on a fait suffisamment de pas depuis la dernière mesure **alors**

 Calculer les observables souhaitées (dont la fonction de Green) dans la
 configuration actuelle grâce à (2.16)⁴¹.

fin

fin

Faire la moyenne sur les observables et calculer leur erreur.

Enregistrer la configuration actuelle des segments pour les réutiliser dans des futurs simulations.

Fonction *FaireUnPas()* :

 Proposer une mise à jour (ajout, retrait de segments ou flip)

 Calculer la probabilité correspondante à la mise à jour

 Accepter ou rejeter la mise à jour

Si on a fait suffisamment de pas depuis la dernière mise à jour propre **alors**

 Faire une mise à jour propre

fin

retour

Algorithme 2: La simulation Monte-Carlo

2.3.1 Partie normale

Symétrie de spin

La partie normale renseigne sur la self-énergie entre les électrons de mêmes spins. Elle s'appelle *normale*, car c'est la seule partie qui est non nulle dans l'état normal. Dans un premier temps, pour empêcher l'état antiferromagnétique et en reprenant les symétries définies en 2.2.1, je choisis :

$$\Sigma_{N\uparrow} = \Sigma_{N\downarrow} \equiv \Sigma_N = \begin{pmatrix} \Sigma_{00} & \Sigma_{01} & \Sigma_{11} & \Sigma_{01} \\ \Sigma_{01} & \Sigma_{00} & \Sigma_{01} & \Sigma_{11} \\ \Sigma_{11} & \Sigma_{01} & \Sigma_{00} & \Sigma_{01} \\ \Sigma_{01} & \Sigma_{11} & \Sigma_{01} & \Sigma_{00} \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

La self-énergie est exprimée dans la base de l'amas que je présente sur la figure 1.3b. On a un total de 3 coefficients distincts pour la partie normale de la self-énergie. Au vu de cette symétrie de spin forcée, le spin total par site est constamment nul.

La phase antiferromagnétique

Un état antiferromagnétique se caractérise par une asymétrie entre spins up et down et un changement du signe du spin d'un site à l'autre. En effet, dans une telle phase, le système n'a toujours pas d'aimantation totale, mais les spins totaux par site sont non nuls. De plus, quand on passe d'un site à son voisin direct (selon les axes \mathbf{x} et \mathbf{y}), le spin change de signe. La forme de la self-énergie présentée au-dessus ne permet donc pas la phase antiferromagnétique.

Dans cet état, le réseau est divisé en deux sous-réseaux - \mathbf{a} et \mathbf{b} - entremêlés. Les comportements des électrons sur les deux sous réseaux peuvent être différents, mais les électrons sur le sous-réseau \mathbf{a} doivent avoir le même comportement que les électrons de spins opposés sur le réseau \mathbf{b} . Sur l'amas, en reprenant la figure 1.3b, les sites 0 et 2 appartiennent au même sous réseau - je le nomme \mathbf{a} - et les sites 1 et 3 sont sur le sous-réseau \mathbf{b} . Cela relâche quelques contraintes sur la forme de la self-énergie et en impose d'autres. Dans les faits, cela rajoute trois nouveaux éléments :

$$\Sigma_{N\uparrow} = \begin{pmatrix} \Sigma_{00}^a & \Sigma_{01}^a & \Sigma_{11}^a & \Sigma_{01}^a \\ \Sigma_{01}^b & \Sigma_{00}^b & \Sigma_{01}^b & \Sigma_{11}^b \\ \Sigma_{11}^a & \Sigma_{01}^a & \Sigma_{00}^a & \Sigma_{01}^a \\ \Sigma_{01}^b & \Sigma_{11}^b & \Sigma_{01}^b & \Sigma_{00}^b \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

$$\Sigma_{N\downarrow} = \begin{pmatrix} \Sigma_{00}^b & \Sigma_{01}^b & \Sigma_{11}^b & \Sigma_{01}^b \\ \Sigma_{01}^a & \Sigma_{00}^a & \Sigma_{01}^a & \Sigma_{11}^a \\ \Sigma_{11}^b & \Sigma_{01}^b & \Sigma_{00}^b & \Sigma_{01}^b \\ \Sigma_{01}^a & \Sigma_{11}^a & \Sigma_{01}^a & \Sigma_{00}^a \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Pour vous faciliter la lecture de ces matrices, les lignes ont le même exposant alors que les colonnes ont une alternance d'exposant. Quelques remarques sur cette opération :

- On brise la symétrie de spin que l'on avait dans l'état normal
- On conserve cependant la symétrie selon la diagonale principale. Heureusement, car les axes ne jouent pas de rôle particulier⁴².
- Comme on avait une symétrie de spin **et** de changement de site dans l'état normal, il vérifie également les symétries de l'état antiferromagnétique. En passant à l'état antiferromagnétique, je n'ai donc fait qu'étendre l'espace des solutions possibles.

La phase antiferromagnétique est alors une phase de symétrie brisée, comme sa construction l'a montré. Cela veut dire qu'il est possible de trouver un paramètre d'ordre pour caractériser cette phase. Pour simplifier, plus le paramètre d'ordre est grand, plus l'état est loin de l'état normal. Ici, intuitivement, on brise la symétrie de spin sur les sites. Le spin doit donc avoir un rôle à jouer dans le paramètre d'ordre. Cependant, comme les sites voisins ont un spin opposé les uns aux autres, le spin total ne peut pas être le paramètre d'ordre, il serait systématiquement nul. Le paramètre d'ordre est défini sur l'amas comme :

$$m = \frac{1}{4} |S_{z,0} - S_{z,1} + S_{z,2} - S_{z,3}|. \quad (2.42)$$

42. Contrairement à d'autres études (par exemple dans les références [34, 35]) dans lesquelles les auteurs tiennent compte de la différence entre les axes. On appelle cette phase la phase nématique lorsqu'elle apparaît spontanément à cause d'interactions électroniques.

On voit donc que plus m est grand, plus le système est dans un état loin de l'état normal dans lequel m est nul.

Je prends une valeur absolue dans la définition du paramètre, car l'orientation sur le site 0 est arbitraire et pourrait être négative ou positive suivant les fluctuations du système⁴³.

2.3.2 Partie anormale

La partie anormale renseigne sur la self-énergie entre les électrons de spin opposés. Comme je suis passé dans l'espace de Nambu, cette partie anormale me renseigne en réalité sur les excitations de paires dans le système.

Pour imposer l'état normal tout d'abord, il suffit de prendre pour cette partie anormale la matrice nulle. En effet, de cette façon, il n'y aura pas d'excitations de paires de particules, soit pas de paires de Cooper. Ensuite, pour passer dans l'état supraconducteur, certains termes de cette matrice doivent être non nuls. Au vu des symétries imposées par le caractère d discuté en 2.2.1, la self-énergie a pour structure :

$$\Sigma_A = \begin{pmatrix} 0 & \Sigma_A^+ & 0 & \Sigma_A^- \\ \Sigma_A^+ & 0 & \Sigma_A^- & 0 \\ 0 & \Sigma_A^- & 0 & \Sigma_A^+ \\ \Sigma_A^- & 0 & \Sigma_A^+ & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Le fait que la fonction d'onde de type d change de signe lors d'une rotation de $\frac{\pi}{2}$ dans l'espace réciproque, impose en effet qu'il n'y ait d'appariement ni entre deux électrons sur un même site ni sur des sites dont les coordonnées diffèrent d'un vecteur $\mathbf{x} + \mathbf{y}$ ⁴⁴. Le caractère d empêche en effet, un appariement entre deux électrons sur un même site, Cette partie anormale ne présente donc que 2 coefficients différents. Ces coefficients sont nommés $pphi$ et $mphi$ dans CT-Seg-3B. Cette phase a également un paramètre d'ordre, car elle correspond à une brisure spontanée de la symétrie de jauge. En réalité, on impose même $\Sigma_A^+ = -\Sigma_A^- \in \mathbb{R}$ pour faciliter la convergence et fixer la jauge. Σ_A^+ pourrait alors être défini comme le paramètre d'ordre. En réalité on préfère se ramener à des fonctions de Green pour le paramètre d'ordre. Je prends donc la définition :

$$\Psi = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} G(mphi, i\omega_n) = \langle d_{0\uparrow} d_{1\downarrow} \rangle. \quad (2.44)$$

La self-énergie et la fonction de Green devant avoir la même structure, les coefficients $pphi$ et $mphi$ de G correspondent aux corrélations entre particules de spins opposées sur des sites voisins.

43. On a bien sûr une symétrie d'inversion selon l'axe z

44. Ces zéros viennent plus précisément du fait que si Δ est une fonction de symétrie d , on a l'égalité, $\sum_{\mathbf{k}} \Delta(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}} \Delta(\mathbf{k}) e^{i(k_x + k_y)} = 0$

Chapitre 3

Résultats

J'ai, dans les parties précédentes, présenté le programme CT-Seg-3B permettant de résoudre approximativement le modèle de Hubbard à trois bandes. Cependant, le but de mon projet de maîtrise, si on revient à l'introduction de ce mémoire, n'était pas de décrire un programme de résolution. En effet, je voulais vérifier que le modèle théorique était en mesure de prédire les résultats expérimentaux. J'ai cependant commencé ce projet par une adaptation de CT-Seg-3B pour pouvoir l'utiliser sur la machine que j'avais à disposition¹. Ensuite, j'ai pu explorer le diagramme de phase supraconducteur pour chercher un lien entre le nombre d'électrons moyen sur les sites d'oxygène et la température critique du matériau.

Cependant, cette tâche est très fastidieuse, car le moyen principal que la méthode met à ma disposition pour déterminer la température critique est d'observer une disparition du paramètre d'ordre. Ici, le paramètre d'ordre est la force d'appariement des paires de Cooper, c'est-à-dire des électrons de spin opposés. Il s'agit d'un nombre complexe. Son amplitude indique si l'état dans lequel on se trouve est bien l'état supraconducteur. Sa phase - que je ne considère pas ici - doit être la même dans toute la phase supraconductrice. Le paramètre d'ordre peut être calculé grâce à la solution du cycle d'autocohérence et il s'agit en réalité de la composante *anormale* de la fonction de Green dans la représentation de Nambu :

$$G_{\uparrow\downarrow CuCu}(\vec{R}_0, \vec{R}_0 + \vec{x}) = \langle d_{0\uparrow} d_{1\downarrow} \rangle \quad (3.1)$$

c'est-à-dire les corrélations entre les électrons de spins ups et down sur des sites voisins de l'impureté. J'impose de plus, au travers du programme, que ce terme soit un nombre réel.

Cette méthode est assez similaire à celle que l'on pourrait utiliser expérimentalement. En effet, une façon de déterminer la température de transition expérimentalement pour un matériau est d'effectuer des mesures de résistance successives pour des températures différentes. De cette façon, il est simple de trouver la température de transition qui correspond à la température à laquelle la résistance chute significativement. Ce type de mesure est illustré en Fig. 3.1. Ici, c'est donc l'inverse. Pour trouver la température de transition, à un dopage donné - comme pour un matériau réel - j'effectue des simulations à plusieurs températures au sein de la phase supraconductrice. Je regarde ensuite la courbe du paramètre d'ordre en fonction de cette température. Pour identifier la phase supraconductrice, il suffit de regarder les températures pour lesquelles ce paramètre d'ordre est non-nul³. La température critique

1. à savoir trois superordinateurs de Calcul Canda : Mammouth (Mp2b), Beluga et Cedar

2. En pratique, je prends comme définition du paramètre d'ordre la moyenne de deux termes selon \mathbf{x} et \mathbf{y} : $\frac{1}{2} (G_{\uparrow\downarrow CuCu}(\vec{R}_0, \vec{R}_0 + \vec{x}) - G_{\uparrow\downarrow CuCu}(\vec{R}_0, \vec{R}_0 + \vec{y}))$. Cela permet d'améliorer la précision du résultat. Le signe - vient de la symétrie d du paramètre d'ordre.

3. Ou plus exactement supérieur à la valeur 0.002, comme j'en discute en annexe en 3.2.1.

est alors la plus haute température à laquelle ce paramètre d'ordre est non nul.

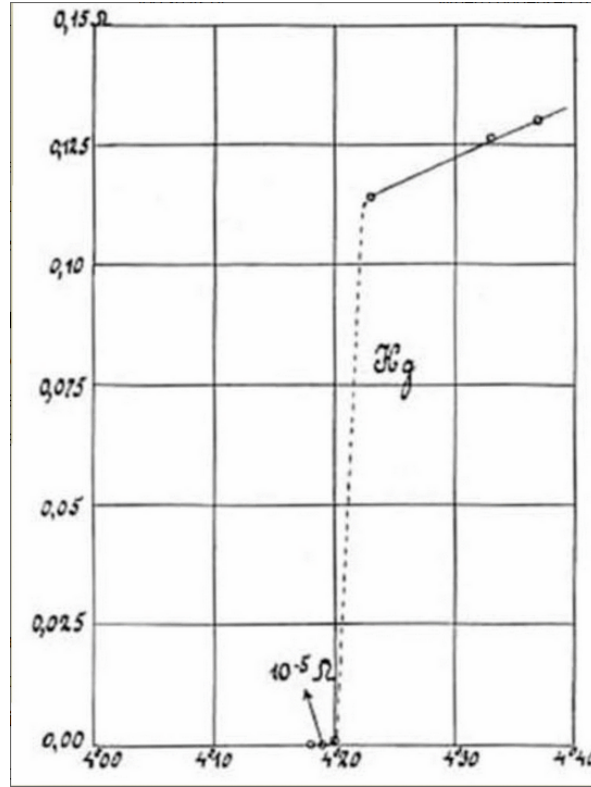


FIGURE 3.1 – Expérience originale de H. Kamerlingh Onnes mesurant la résistivité du mercure en fonction de la température (1911). On observe qu'autour de 4.2K, la résistivité du matériau chute d'environ 0.1Ω à $10^{-5}\Omega$ [36]

Un problème se pose cependant dans cette façon de faire. En effet, CT-Seg-3B n'accepte pas en entrée une occupation, mais un potentiel chimique. Ces deux quantités sont liées, mais à un potentiel chimique donné, l'occupation correspondante change quand la température change. Il n'est donc pas possible de fixer une occupation et de voir comment le paramètre d'ordre évolue avec la température. Il faut alors, pour chaque température, calculer l'état du système à plusieurs potentiels chimique pour pouvoir déduire la relation entre occupation et température critique, ce qui est plus contraignant. Je vais donc tout d'abord regarder le comportement du paramètre d'ordre seul à une température fixée. Ici, je ne peux plus continuer mon analogie avec la méthode expérimentale et la mesure de la résistance. En effet, la résistance d'un matériau avant sa transition vers la phase supraconductrice n'a pas réellement de lien avec celle que l'on retrouve au sein de cette phase. Une mesure de la résistance à une température donnée ne donne alors généralement pas d'information sur l'ordre de grandeur de T_C .

Après cette étude approfondie du paramètre d'ordre, je remarquerai que les relations que j'ai trouvées entre occupation et paramètre d'ordre sont très similaires à celle que l'on trouve entre occupation et température critique. Ensuite, il sera nécessaire de corriger ces résultats, car il se trouve que la température critique telle que définie au-dessus ne correspond pas exactement à la réalité du phénomène supraconducteur. Enfin, je verrai plusieurs autres comportements étonnants d'observables quand je me déplace au sein du dôme supraconducteur

et notamment discuterai du régime d'hystérèse et de discontinuité rencontrés au cours de l'exploration du diagramme de phase.

3.1 Paramètre d'ordre

Le paramètre d'ordre est une observable intéressante à considérer et l'étude de celui-ci à une température fixée fournit des renseignements sur la température critique. En effet, dans la théorie de Landau [37], le paramètre d'ordre et la température sont liés par une formule simple :

$$\Psi(T)^2 = \frac{a_0}{b_0}(T_C - T) \quad (3.2)$$

où a_0 et b_0 sont des constantes indépendantes de la température. Cette relation est approchée et n'est valable que proche de la température critique T_C . Si le rapport $\frac{a_0}{b_0}$ est indépendant du dopage, on remarque que la mesure du paramètre d'ordre nous renseigne directement sur la température critique. Même si je ne peux pas démontrer cette indépendance, le paramètre d'ordre à température nulle et la température critique sont reliés empiriquement. En effet, le paramètre d'ordre est la quantité qui permet de caractériser la phase supraconductrice. Plus il est grand, plus il existe des paires de Cooper dans le matériau, plus la température critique sera grande⁴. Je vais donc, ici, seulement garder l'argument qualitatif et commencer par étudier le paramètre d'ordre du système à température fixée. Je montrerai ensuite, en déterminant la température critique du système, que l'étude du paramètre d'ordre nous renseigne bien sur cette dernière.

3.1.1 Occupation totale et introduction aux graphes

Point de départ Dans cette première section, je vais m'occuper de voir comment le paramètre d'ordre se comporte quand on se déplace dans le dôme supraconducteur. La démarche que j'ai utilisée ici consiste à étudier le modèle aux paramètres de départ (1.4) puis à changer chaque paramètre, un à un. Cette méthode est très simple et me permet d'avoir un aperçu sur tout le voisinage du point de départ systématiquement en étudiant chaque direction. Le but ici est de voir si les paramètres microscopiques du modèle, autour du point de départ ont un effet commun sur le paramètre d'ordre. Ici, j'ai fixé la température à $\beta = 60$ ⁵ qui est une température assez basse pour avoir un paramètre d'ordre non nul dans le domaine des paramètres étudié et une des températures les plus basses que CT-Seg-3B peut atteindre à cause du problème de signe. La courbe du paramètre d'ordre en fonction du dopage à cette température et aux paramètres de départ (1.4) est donnée par la courbe bleue de la figure 3.2.

On observe que cette courbe a une belle forme de dôme comme on l'aurait attendue d'un graphe de la température critique en fonction du dopage en trous. D'ailleurs, généralement, l'expression «dôme supraconducteur» réfère à la forme de dôme que prend la courbe de la température critique quand elle est tracée en fonction du dopage en trous (1.1b). Par analogie avec cela, je vais également appeler dôme supraconducteur le dôme du paramètre d'ordre quand il est tracé en fonction du dopage. Je remarque alors que la supposition empirique que le paramètre se comporte comme la température critique peut-être observée sur ce graphique simple. Ce dôme semble cependant assez asymétrique avec une diminution plus lente du

4. Sans tenir compte des effets des fluctuations de phase pour le moment

5. Toujours en unité de t_{pp}

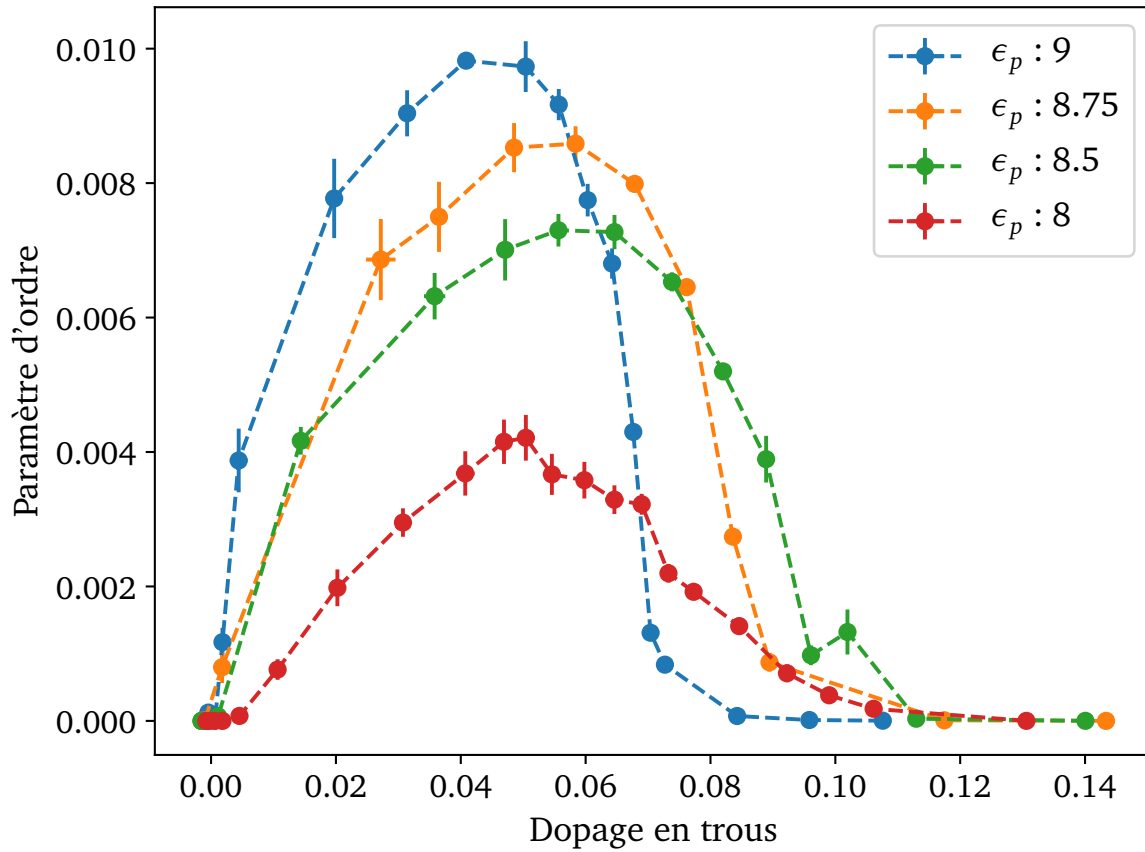


FIGURE 3.2 – Paramètre d'ordre en fonction du dopage en trous total pour différentes valeurs de ϵ_p plus petites que celle du point de départ (1.4). Les points correspondent aux résultats du cycle CMDFT alors que les traits pointillés sont uniquement là pour guider l'œil. Les barres d'erreur ont été multipliées par un facteur 4 pour pouvoir les voir et ainsi remarquer les régimes où la simulation a eu plus de mal à converger. C'est le cas pour toutes les figures dans lesquelles on voit des barres d'erreur. La partie 4.1.1 contient plus de précisions sur le calcul de cette erreur.

paramètre d'ordre du côté sous-dopé - dopage faible - que du côté surdopé pour lequel le paramètre d'ordre disparaît très abruptement autour de 7%. Je discuterai de cette asymétrie plus en détail dans la partie 3.2.2. La valeur du dopage maximal auquel la supraconductivité existe est basse par rapport aux valeurs habituelles qui tournent autour de 20 à 30% [38, 23]. Cette différence peut s'expliquer par deux choses principales :

- J'étudie ici le modèle à température finie et assez haute, proche de T_C (qui se trouve autour de $\beta = 45$ comme on pourra le voir plus loin). Le dôme supraconducteur est donc beaucoup moins large qu'à sa base.
- Les paramètres choisis ne correspondent pas à des matériaux réels donc la phase supraconductrice peut être différente. On peut cependant voir dans la référence [23] qu'à température nulle, le paramètre d'ordre est non nul pour des valeurs plus grandes du

dopage, pour les mêmes paramètres utilisés ici. Dans ce même article, on observe que les paramètres réels rendent encore mieux compte de la vraie largeur du dôme et que cette largeur varie très rapidement avec les paramètres du modèle.

Encore, je remarque que la supraconductivité disparaît exactement au niveau du demi-remplissage. Ce comportement n'est pas normal pour des matériaux réels, car la phase antiferromagnétique est censée empêcher la phase supraconductrice d'exister pour de faibles valeurs de dopage. Comme je ne tiens pas compte de la possibilité d'une phase antiferromagnétique (je force pour le moment une symétrie incompatible), je ne peux pas observer ce phénomène et la supraconductivité est libre d'apparaître proche d'un dopage nul⁶. De plus je mentionnerai plus tard qu'un autre phénomène explique également cette tendance proche du demi-remplissage et me permettra de corriger cette forme en partie (voir 3.2.2).

Énergie de transfert de charge ϵ_p À partir de ce point de départ, il faut maintenant visiter d'autres valeurs des paramètres. Je vais faire cela progressivement en commençant par ϵ_p . En commençant par baisser la valeur de ϵ_p - toujours sur la même Fig. 3.2 - je remarque tout d'abord que le paramètre d'ordre diminue. J'observe ici que pour une augmentation de 10% de ϵ_p , le paramètre d'ordre se voit divisé par deux. Le paramètre d'ordre est donc très sensible aux variations de ϵ_p . Je ne remarque pas de tendance spéciale quand à la position du dôme supraconducteur en fonction du dopage. Les dômes sont plus ou moins les uns au-dessus des autres et aucune tendance ne se dégage.

Puis, dans la figure 3.3 j'augmente la valeur de ϵ_p et une chose assez étrange se produit. En effet, pour la valeur $\epsilon_p = 9.1$, je retrouve une augmentation du paramètre d'ordre, ce qui est cohérent avec ce que je viens juste de discuter pour une diminution de ϵ_p . Cependant, pour des valeurs supérieures, j'observe deux comportements différents du précédent. En augmentant progressivement la valeur du paramètre, j'ai tout d'abord l'impression que le dôme supraconducteur a été étêté. Ce régime correspond en réalité à un régime d'hystérèse et est visible ici sur les courbes vertes et rouges. Ensuite, en augmentant encore cette valeur, le dôme supraconducteur disparaît complètement avec la phase isolante. Ces comportements d'hystérèse se retrouvent pour des variations de chacun des paramètres, sont visibles sur la plupart des observables qui m'intéressent et je les décris plus en détail dans la partie (3.4).

Énergie d'interaction - U Cette fois-ci c'est en diminuant U que l'on augmente le paramètre d'ordre. J'ai changé la valeur de U sur la figure 3.4a et j'observe le même comportement des dômes que l'on avait avec ϵ_p . Il faut diminuer U de 15% pour diviser le paramètre d'ordre par 2. Cela correspond donc à une dépendance relative moins accentuée du paramètre d'ordre. Cependant, une comparaison en pourcentage n'est pas vraiment indicative quand on compare U et ϵ_p car ces énergies correspondent toutes deux à des énergies d'occupation. Il ne faut pas donc comparer leurs variations relatives mais bien leurs variations absolues. Pour se rendre compte de cela, je compare directement les dômes obtenus pour une certaine valeur de $U - \epsilon_p$ sur la figure 3.4b, représentés par une même couleur mais des symboles différents. J'observe une forte similitude entre les courbes présentant une même valeur de $U - \epsilon_p$. C'est de cette première observation ainsi que de travaux antérieurs [3], qu'est venue l'idée de comparer le gap

6. Elle disparaît cependant à dopage nul, à cause de la compétition avec l'isolant de transfert de charge qui apparaît à cet endroit.

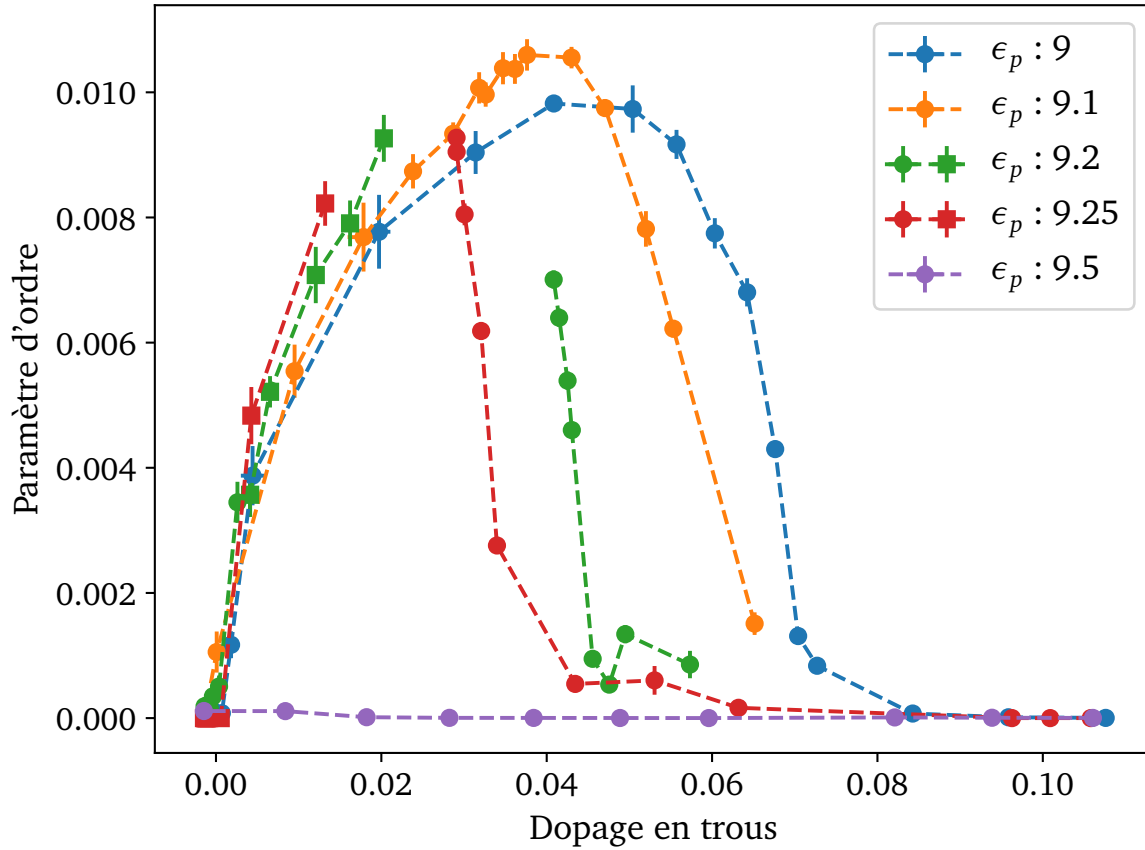


FIGURE 3.3 – Paramètre d'ordre en fonction du dopage en trous total pour différentes valeurs de ϵ_p plus grandes que celle du point de départ (1.4). Les points représentés par un cercle, ont été obtenus successivement à partir des états de plus petits potentiels chimiques (plus grand dopage en trous). Les points représentés par des carrés sur les courbes verte et rouge ont été obtenus à partir de l'autre côté. Entre les deux parties de ces deux courbes, il n'y a pas d'états. Les courbes bleu, orange et violette ne présentent pas de régime d'hystérèse dans l'état supraconducteur autour du demi-remplissage.

de transfert de charge dans le modèle sans interaction à l'intensité du paramètre d'ordre pour vérifier que les résultats correspondaient bien aux observations expérimentales. Je regarde son effet sur le paramètre d'ordre un peu plus loin en (3.1.3).

Saut premier voisin entre atomes de cuivre et d'oxygène - t_{pd} Je vous propose de vous tourner maintenant vers la figure 3.4c. Le comportement ressemble encore à ce que je vient de discuter. En abaissant t_{pd} , on observe une diminution du paramètre d'ordre alors qu'en augmentant ce saut premier voisin mixte, on observe un comportement anormal puis une disparition de la phase supraconductrice. Remarquons en passant que les variations de t_{pd} par rapport au paramètre d'ordre sont du même ordre que pour ϵ_p en pourcentage. En effet, pour un changement de 12% dans la valeur de t_{pd} , le paramètre d'ordre se voit divisé par 2.

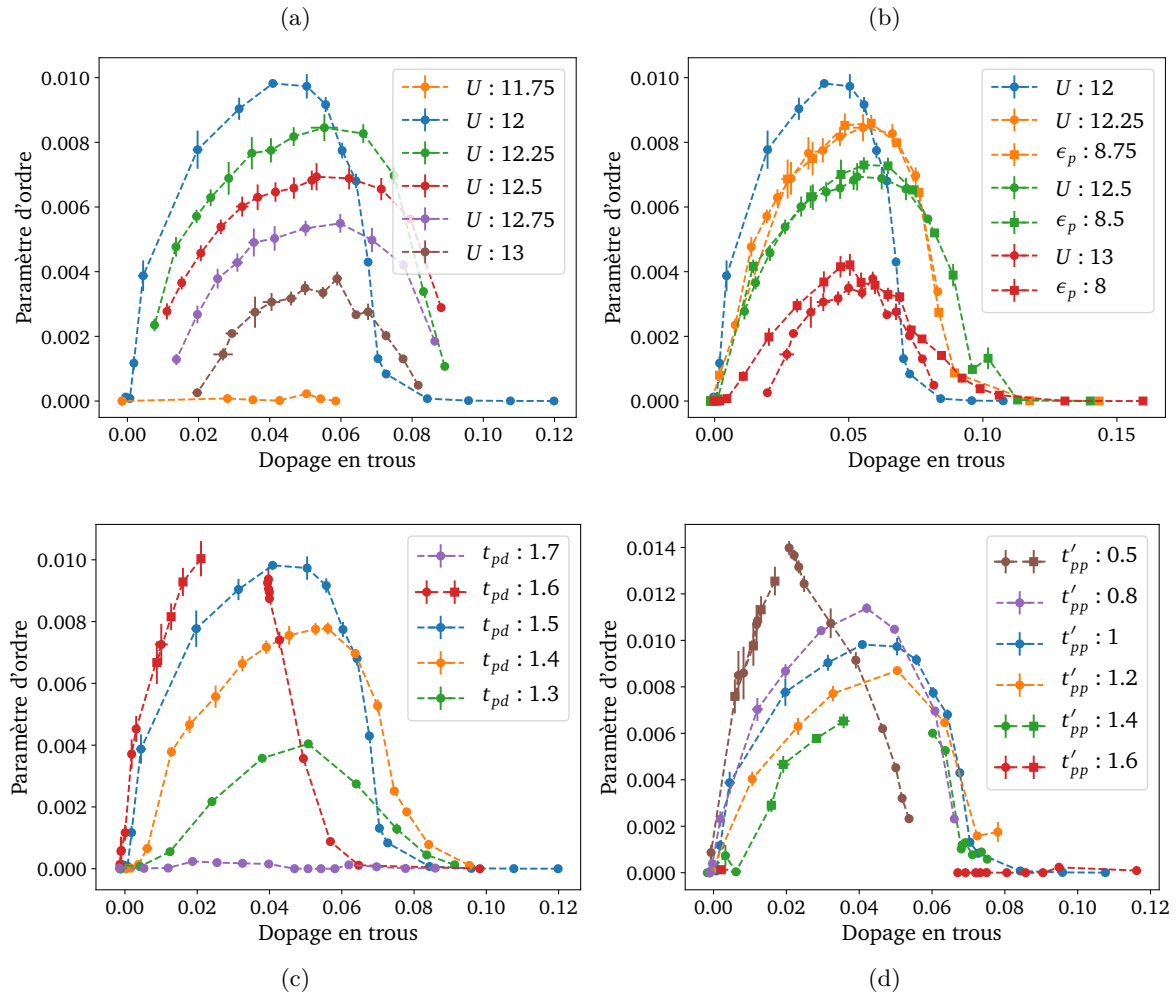


FIGURE 3.4 – Paramètre d'ordre en fonction du dopage en trous total pour différentes valeurs de U , ϵ_p , t_{pd} et t'_{pp} . À chaque fois, les autres paramètres sont pris égaux à ceux du point de départ (1.4). La courbe bleue claire sur chaque figure correspond au point de départ. Sur la courbe (b), les courbes de la même couleur présentent la même valeur de $U - \epsilon_p$ et sont très similaires. Sur les courbes (c) et (d), j'ai représenté avec des ronds les points obtenus à partir d'une solution sur-dopée et avec des carrés les points obtenus à a partir du demi-remplissage.

Saut second voisin entre atomes d'oxygène - t'_{pp} Sur la figure 3.4d, on observe cette fois qu'en augmentant t'_{pp} , on diminue le paramètre d'ordre. De plus, les variations du paramètre d'ordre avec t'_{pp} sont beaucoup plus faibles qu'avec les autres paramètres. Ici, il faut augmenter t'_{pp} de 80% pour diviser le paramètre d'ordre par 2. Sur cette figure, ensuite, je remarque quelque-chose de différent des autres dômes. En effet, il y a deux dômes étêtés. Un pour un grand paramètre d'ordre ($t'_{pp} = 0.5$) et l'autre pour un petit paramètre d'ordre ($t'_{pd} = 1.4$). En 3.1.1, j'ai montré qu'à augmenter trop ϵ_p , on tombe dans un régime spécial où le dôme est étêté. Avec $t'_{pp} = 0.5$, on tombe effectivement dans ce régime. Cependant de l'autre côté

du point de départ (courbe bleue) à $t'_{pp} = 1.4$, l'étêtement du dôme ne correspond pas à un grand paramètre d'ordre. C'est le seul paramètre pour lequel j'observe un tel comportement et j'en discuterai plus en détail dans une partie suivante (3.4.1).

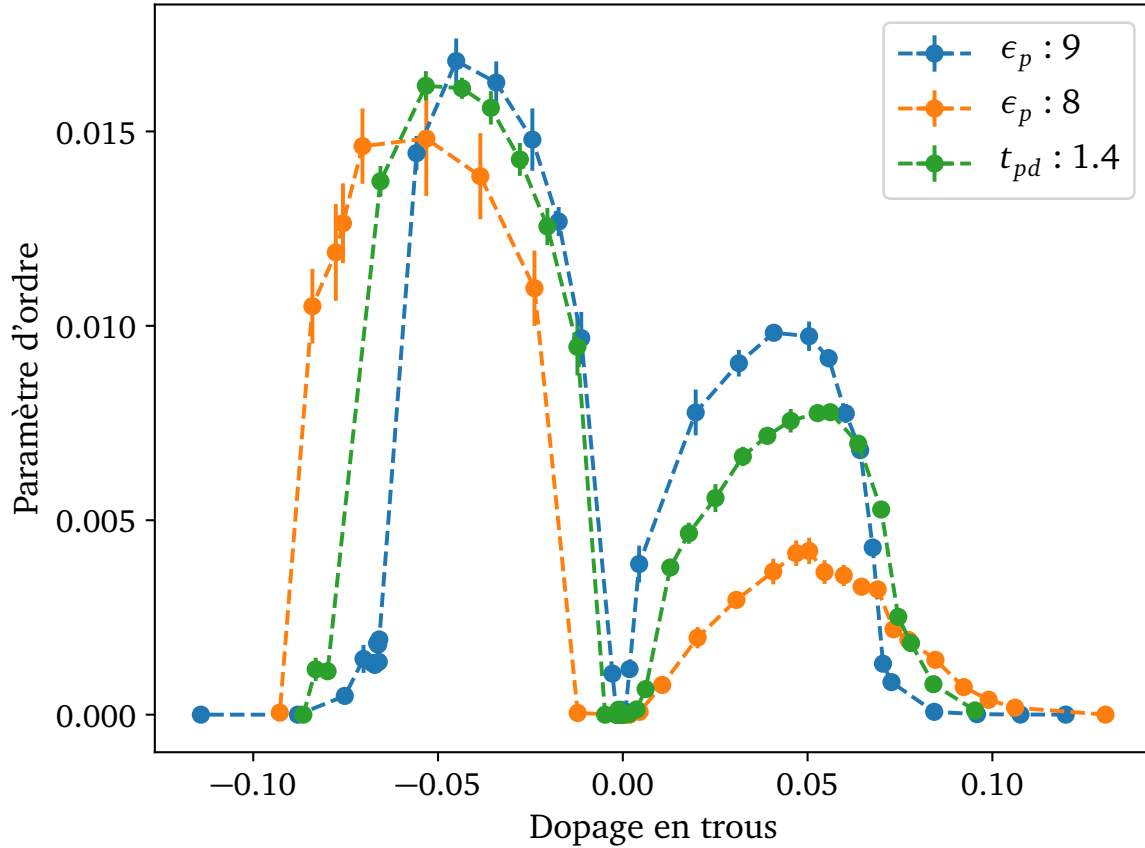


FIGURE 3.5 – Paramètre d'ordre en fonction du dopage en trous total pour quelques paramètres. On observe bien deux dômes, de chaque côté du demi-remplissage. Du côté surdopé en électrons (à gauche), on observe une décroissance abrupte du paramètre d'ordre. Il y a, à cet endroit, une transition du premier ordre.

Et de l'autre côté ? Jusqu'à maintenant, je n'ai montré que des dômes supraconducteurs du côté dopé en trous. Cependant, et comme on peut le voir sur la figure 1.1b par exemple, il y a un autre dôme, beaucoup plus petit du côté dopé en électrons. Je trace sur la figure 3.5 le paramètre d'ordre obtenu en CDMFT en fonction du dopage total pour montrer ces deux dômes. Au premier coup d'œil, on observe une différence majeure avec le diagramme de phase, à savoir que le dôme côté dopé en électrons est bien plus grand que celui de l'autre côté. Cette observation peut paraître bizarre de prime abord mais le modèle à une bande donne en réalité le même résultat. Cette différence ne discrédite pas le modèle de Hubbard côté dopé en électrons car je ne considère pas la phase antiferromagnétique ici. Je commente d'ailleurs dans la partie (3.6) plus en détail le comportement de ce diagramme de phase en relation avec la phase antiferromagnétique.

Ensuite, je ne le montre pas ici, mais on retrouve également les mêmes comportements d'hysteresis que du côté dopé en trous. Les deux côtés du demi-remplissage sont donc très comparables et je continue de me concentrer dans la suite de ce mémoire sur le côté dopé en trous.

Conclusion Le paramètre d'ordre varie donc bien avec les paramètres microscopiques du modèle. Ensuite, on a vu qu'il diminuait avec la valeur de U , ce qui est cohérent avec le modèle à une bande. Puis, il augmente avec ϵ_p , ce qui indique que le gap de transfert de charge joue influence la supraconductivité dans le modèle à trois bandes. Cela me conforte donc dans l'idée que ce modèle permet de bien décrire les cuprates. Enfin, chaque paramètre modifie les dômes supraconducteurs à sa façon, avec un comportement un peu différent pour t'_{pp} . Je discute un peu plus en détail de l'effet de ce paramètre dans la partie 3.4.1. Je vais pouvoir rentrer dans le coeur de ce projet, à savoir la dépendance du paramètre d'ordre au dopage sur les sites d'oxygène.

3.1.2 Dopages sur les sites atomiques

Maintenant que vous êtes habitués aux graphes de paramètre d'ordre en fonction de l'occupation, je vais en introduire de nouveaux, très similaires. Cette fois-ci, je vais tracer le paramètre d'ordre en fonction du dopage sur les sites atomiques de cuivre et d'oxygène. En effet, le modèle fonctionne à peu près sur le même principe que les expériences. Je peux modifier le dopage total, par l'intermédiaire du potentiel chimique μ et ce dopage se répartit sur les sites de cuivre et d'oxygène. Je ne contrôle pas directement la répartition du dopage sur les sites atomiques. Puis, comme je me suis intéressé plus particulièrement au dopage en trous, je vais me concentrer sur le dopage sur les atomes d'oxygène. En effet, des études théoriques et expérimentales précédentes [39, 14, 40, 41] montrent que doper en trous proche du demi-remplissage revient à doper principalement sur les sites d'oxygènes. Cela me permettra également d'avoir des figures plus claires et plus aérées⁷ - ce qui n'est pas une mince affaire vu le nombre de courbes que je présente.

Je rappelle que toutes les courbes que je montre ici sont dans le régime du dôme supraconducteur. J'oublie donc pour le moment les régimes d'hystérèse et de pseudogap dont je discuterai plus tard en 3.4 et 3.4.1. Je ne présente donc que les dômes complets ici.

Regardez donc la figure 3.6 sur laquelle j'ai tracé le paramètre d'ordre en fonction du dopage total en oxygène. Je commence, comme au-dessus, par ne regarder que l'effet de ϵ_p sur l'allure des courbes. Cette figure est bien évidemment très similaire à la Fig. 3.2 - car je trace les mêmes points sur les deux figures - sauf que les dômes semblent se décaler vers de plus grandes valeurs de dopage à mesure que l'on augmente ϵ_p . Je remarque sur cette figure une corrélation entre le dopage en trous sur les sites oxygènes et le paramètre d'ordre. Bien sûr, à ce stade, il ne s'agit que d'une corrélation. Je ne peux pas conclure sur une quelconque relation entre dopage et paramètre d'ordre. En effet, en réfléchissant dans le modèle sans interaction, on remarque que si on augmente l'énergie sur site d'oxygène, il devient plus coûteux en énergie d'avoir un électron sur un site d'oxygène, ce qui revient à avoir une occupation plus faible sur les sites d'oxygène. On peut donc comprendre cette tendance sans la supraconductivité.

7. En effet, les courbes d'occupation sur les sites de cuivre ne sont pas des dômes et présentent des points de retour en arrière comme on le voit légèrement sur la figure 3.15

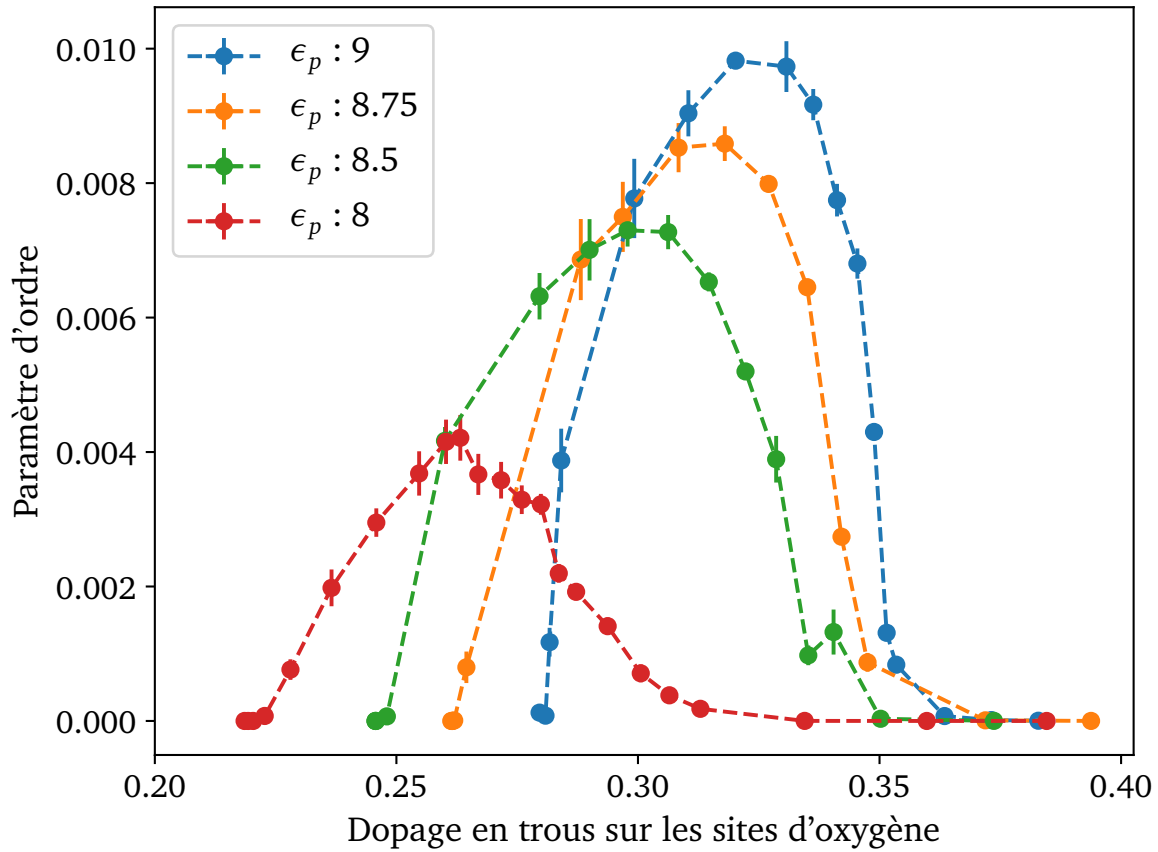


FIGURE 3.6 – Paramètre d'ordre en fonction du dopage en trous sur les sites d'oxygène pour différentes valeurs de ϵ_p . On observe que les dômes se déplacent vers de plus grandes valeurs de dopage à mesure que le paramètre d'ordre maximal grandit.

On pourrait alors conclure que ϵ_p influence à la fois le dopage sur les sites d'oxygène et le paramètre d'ordre sans qu'il y ait de liens entre les deux.

Tournez-vous maintenant vers la figure 3.7, où je rajoute cette fois les dômes obtenus pour des variations des différents paramètres du modèle. Sur cette figure, j'observe encore que cette relation entre paramètre d'ordre et occupation sur les sites d'oxygène vaut pour tous les autres changements de paramètre que l'on peut faire dans le modèle. L'observation de tels graphes ne prouve bien sûr pas grand-chose de plus. Cependant, le fait qu'une telle corrélation s'observe pour tous les paramètres me conforte dans l'idée que cette corrélation n'est pas uniquement un hasard, mais l'indice qu'il existe un lien entre le dopage sur les sites d'oxygène et le paramètre d'ordre.

Pour résumer ces corrélations et pour alléger encore la visualisation du phénomène, je trace sur la figure 3.8 le maximum du paramètre d'ordre en fonction de l'occupation sur les sites d'oxygène à laquelle il est atteint. Je ne garde alors pour chaque dôme de la figure 3.7 que son point culminant.

Sur cette figure, il est clair que cette corrélation n'est pas totale. En effet, il n'est pas

8. Les valeurs exactes des paramètres n'est pas la chose importante ici.

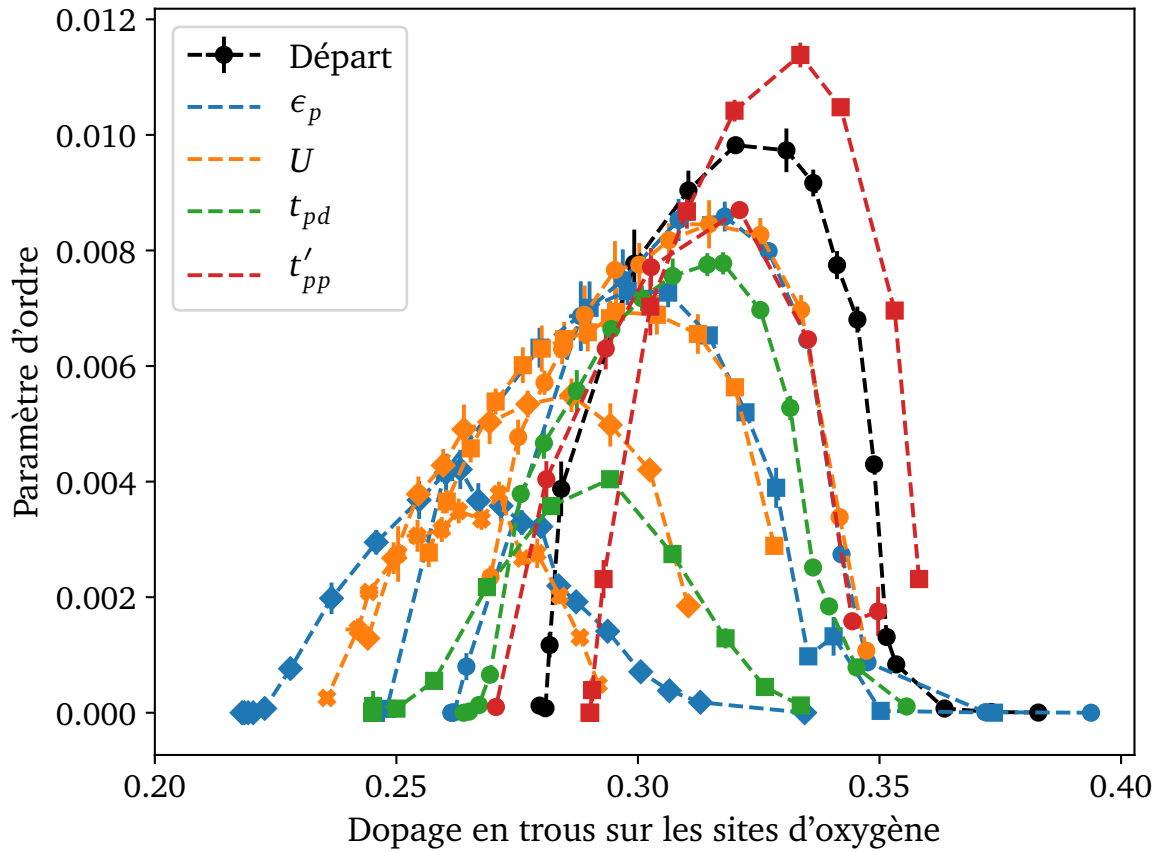


FIGURE 3.7 – Paramètre d'ordre en fonction du dopage en trous sur les sites d'oxygène pour différentes valeurs des paramètres. Chaque courbe est caractérisée par une couleur et un symbole. La couleur correspond au paramètre changé par rapport au point de départ (1.4) tel qu'indiqué dans la légende. Le symbole permet de distinguer les différents dômes, obtenus pour différentes valeurs du paramètre correspondant à la couleur⁸. On observe une certaine corrélation entre dopage sur les sites d'oxygène et paramètre d'ordre. À la différence de la figure précédente, cette corrélation n'est pas totale.

possible d'associer un paramètre d'ordre maximal à chaque occupation des sites oxygènes, il existe des valeurs de dopage en oxygène pour lesquels plusieurs valeurs du paramètre d'ordre sont possibles. Il suffit de prendre les courbes correspondant à des changements de t_{pd} et de ϵ_p qui s'éloignent l'une de l'autre à mesure que l'on s'éloigne du point commun aux courbes. Cette relation permet cependant de prédire la relation entre les températures critiques de deux matériaux proches dans l'espace de paramètres. Il s'agit donc dans le modèle de Hubbard à trois bandes et à cette position dans l'espace du paramètre d'une bonne approximation de premier ordre de dire que le paramètre d'ordre est corrélé au dopage sur les sites d'oxygène.

Notez cependant sur cette figure le comportement de la courbe de t'_{pp} . Pour de grands paramètres d'ordre, elle se comporte comme celle de t_{pd} , puis semble tomber plus bas. Cela est dû au fait que les paramètres utilisés pour les deux points les plus bas présentent des

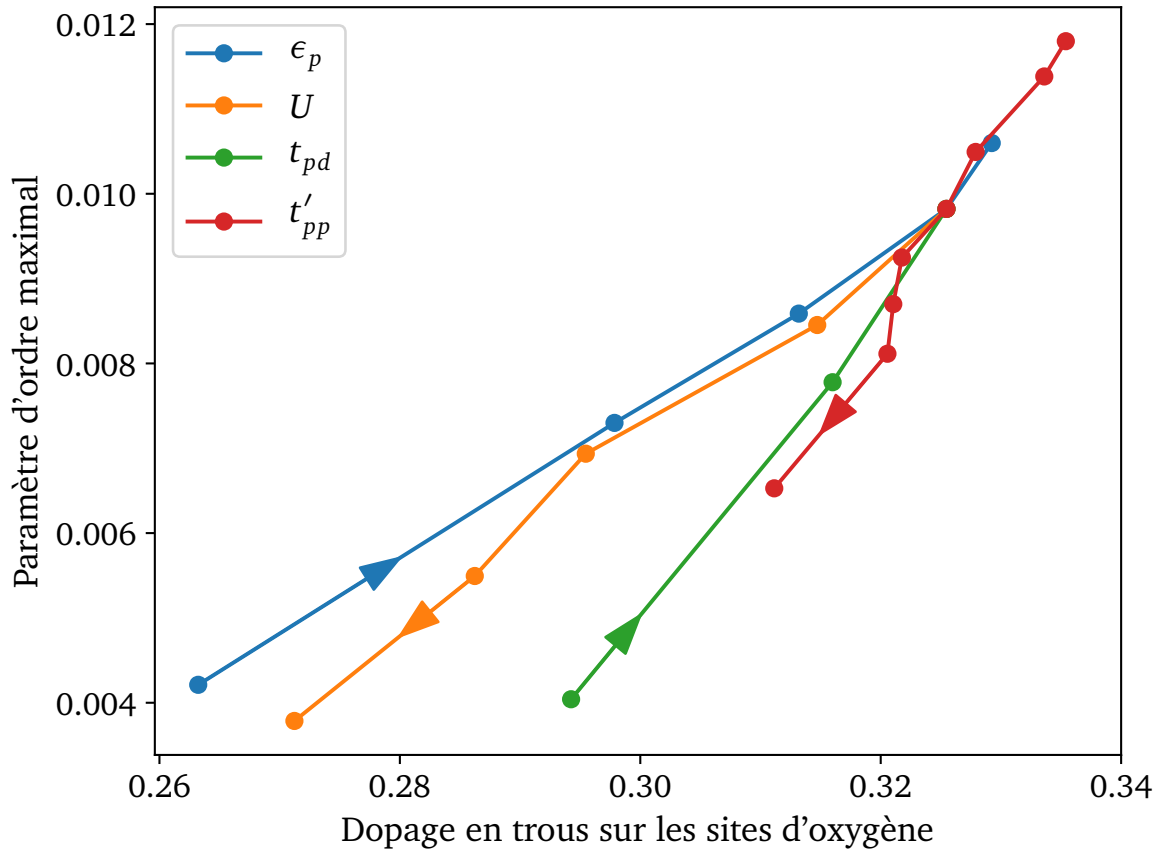


FIGURE 3.8 – Représentation résumée de la corrélation entre occupation sur les sites d'oxygène et paramètre d'ordre. Pour mieux pouvoir interpréter ce graphe, il faut comprendre que le point commun à toutes les courbes (en haut à droite) est le point de départ (1.4). À partir de ce point de départ, j'ai changé les paramètres un par un, en laissant les autres égaux à leur valeur à ce point de départ. Puis pour chaque ensemble de paramètres, j'ai tracé uniquement le paramètre d'ordre maximal ainsi que l'occupation en oxygène à laquelle ce maximum est atteint. L'impression que toutes les courbes se rejoignent en un point puis se séparent à mesure que l'on se s'éloigne de ce point vient de ce choix de procédure. Chaque flèche indique la direction dans laquelle le paramètre augmente. Par exemple, le paramètre d'ordre augmente avec ϵ_p .

dômes étêtés⁹. Le maximum est donc plus bas que ce qu'il serait si le dôme avait été complet. En l'absence de ce régime spécial pour t'_{pp} , t_{pd} et t'_{pp} présentent un comportement similaire, légèrement différent de celui rencontré pour ϵ_p et U .

J'ai donc pu, grâce au programme CT-Seg-3B, étudier la solution au modèle de Hubbard à trois bandes dans un domaine de paramètres ne correspondant a priori pas à des matériaux réels, mais bien à une image idéalisée de l'isolant de transfert de charge. CT-Seg-3B ne permettant pas d'accéder à des paramètres correspondant à des matériaux réels, sûrement du fait de la trop grande hybridation entre les bandes de cuivre et d'oxygène, je me suis

9. Ce qui est dû à l'apparition d'un régime de discontinuité donc je parle un peu plus loin en 3.4

turné vers Sidharta Dash pour vérifier ce comportement dans des paramètres correspondant à des paramètres réels. Comme nous le transcrivons dans un article [15], il retrouve le même comportement dans cet autre régime de paramètres. Les dômes supraconducteurs présentent cependant un paramètre d'ordre plus grand et atteignent des valeurs de dopage plus élevées que les paramètres que j'utilise ici. Puis, la corrélation observée avec ces paramètres n'est encore pas totale et il y a même une grande différence entre les deux ensembles de paramètres. Mais, comme on peut voir dans [18], les paramètres correspondant à des matériaux réels sont, en réalité, assez proches les uns des autres¹⁰. On peut donc penser qu'au sein des cuprates, il y a une bonne corrélation entre paramètre d'ordre et occupation sur les sites d'oxygène.

3.1.3 Gap de transfert de charge

J'ai défini en 1.3.2 le gap de transfert de charge. De nombreux articles le relient à la température critique et il semble être au centre du phénomène dans les cuprates [3, 42]. La figure 4 dans la référence [3] est particulièrement marquante. Comme il est possible d'obtenir la densité d'états directement à partir de la fonction de Green, le gap de transfert de charge est aussi quelque chose de simple à obtenir. C'est sans compter sur les fréquences de Matsubara. En effet, la densité d'états s'obtient à partir de la fonction $G(\omega)$ où ω est une fréquence réelle. Cependant, CT-Seg-3B ne permet que d'obtenir $G(i\omega_n)$ qui est la fonction de Green étendue à l'axe imaginaire du plan complexe. Il est très facile d'obtenir $G(i\omega_n)$ à partir de $G(\omega)$, mais l'opération inverse est beaucoup plus délicate. Il existe plusieurs solutions approchées à cette opération[43, 44, 45] - qui est en réalité un problème mal défini - que je ne décrirai pas ici. Avant de regarder les résultats de telles méthodes approchées, je vais reparler du modèle sans interactions. En effet, il est possible dans ce modèle d'approcher la taille du gap de transfert de charge, très facilement.

Retour au modèle sans interactions

Je présente sur la figure 3.9 la densité d'états pour différents paramètres. Pour comprendre ces courbes, voici quelques explications :

- La ligne noire pointillée symbolise le niveau de Fermi (E_f) pour le cas du demi-remplissage (5 électrons). J'ai décalé, pour chaque courbe, l'origine des énergies pour que l'énergie nulle corresponde au niveau de Fermi, ce qui permet de comparer les courbes plus facilement.
- Sur chaque figure (pour chaque paramètre), j'ai tracé 3 DOS. Pour chaque couleur, il y a deux épaisseurs de traits. Le trait le plus épais - qui présente un pic à gauche - correspond à la DOS de cuivre alors que le trait plus fin correspond aux oxygènes. La DOS que j'appelle d'oxygène ici correspond à la somme des deux DOS d'oxygène puisque j'en considère deux bandes¹¹. Je n'ai pas indiqué la valeur des paramètres volontairement, car le but ici est non pas de relier le changement des paramètres à une autre quantité, mais bien de relier le paramètre d'ordre à un changement dans la DOS. Comme je l'avais montré en 3.1, le paramètre d'ordre et les paramètres microscopiques du modèle ne varient pas toujours dans la même direction.

10. Proche veut dire dans l'ordre de grandeur de variation absolue que j'ai étudié ici

11. Il se trouve que, vu la symétrie du problème, les deux DOS d'oxygène sont exactement les mêmes

- Pour pouvoir relier un changement de paramètre d'ordre à un changement dans la DOS, j'ai utilisé 3 couleurs par figure qui servent de guide pour l'oeil. Ces couleurs représentent l'intensité du paramètre d'ordre. La courbe rouge correspond à un paramètre d'ordre plus élevé que la courbe verte qui à son tour représente un paramètre d'ordre plus élevé que la courbe bleue.
- Enfin, la valeur de U correspondant à l'énergie d'interaction est affichée en tant qu'une ligne pointillée colorée et verticale. Ici, U semble prendre des valeurs entre 0 et 5, mais cela vient simplement du choix de référence des énergies introduit dans le premier point.

Avec ces quelques explications, analysons donc ces figures. On remarque que bien sûr beaucoup de choses varient sur ces figures : la largeur des pics, les positions relatives de ces pics par les uns par rapport aux autres ou même par rapport au niveau de Fermi, à la valeur de U , les tailles des pics secondaires de cuivre au niveau de Fermi, des oxygènes à basse énergie...

Le but ici est de trouver une caractéristique commune des différentes DOS qui varie avec le paramètre d'ordre, quel que soit le paramètre touché. Cela peut sembler un peu trop général, mais comme il est difficile de relier ces paramètres intuitivement aux propriétés des matériaux réels, il semble normal de vouloir chercher quelque chose de ce type. Il faudrait que cette caractéristique puisse ensuite être reliée à une explication physique pour que cette étude ait du sens et puisse supporter (ou non) les résultats expérimentaux. Les deux caractéristiques communes que j'ai trouvées dans ces graphiques sont l'espacement entre les bandes de cuivre et d'oxygène ainsi que la distance du haut de la bande d'oxygène à l'énergie de double-occupation U (qui correspond à une approximation du gap de transfert de charge).

La première caractéristique est assez claire sur les graphiques de ϵ_p et t'_{pp} , car les deux bandes semblent s'écarter à mesure que le paramètre d'ordre augmente. Sur celui de t_{pd} , cependant, le haut de la bande de cuivre semble varier dans le même sens que le bas de la bande d'oxygène même si la séparation semble aussi augmenter. Ensuite, sur le graphe pour une variation de U , la densité d'états ne changeant pas, cette même variation ne s'observe pas.

Cependant, dans les simulations, on a vu que ϵ_p et t_{pd} ont un effet considérable sur le paramètre d'ordre, alors qu'il varie plus lentement avec t'_{pp} . La distance entre les bandes de cuivre et d'oxygène ne suit cependant pas cette tendance. On ne peut donc pas vraiment relier cette séparation des bandes aux variations du paramètre d'ordre, t'_{pp} devant avoir effet moins prononcé sur la caractéristique que l'on recherche que ϵ_p et t_{pd} .

La taille du gap de transfert de charge¹² est plus claire à voir sur les figures. Cette fois-ci, la ligne représentant la double-occupation U et le haut de la bande d'oxygène vont dans un sens opposé et s'écartent quand le paramètre d'ordre augmente pour ϵ_p and t_{pd} , mais pas pour t'_{pp} . Pour ce dernier paramètre, les deux points de repère s'écartent également, mais moins clairement, car ils bougent tous les deux dans le même sens, ce qui correspond à ce que l'on observe dans les simulations.

On a donc identifié simplement une corrélation entre le gap de transfert de charge et le paramètre d'ordre maximal.

12. Attention, il s'agit bien d'une approximation du gap de transfert de charge dont il est question ici

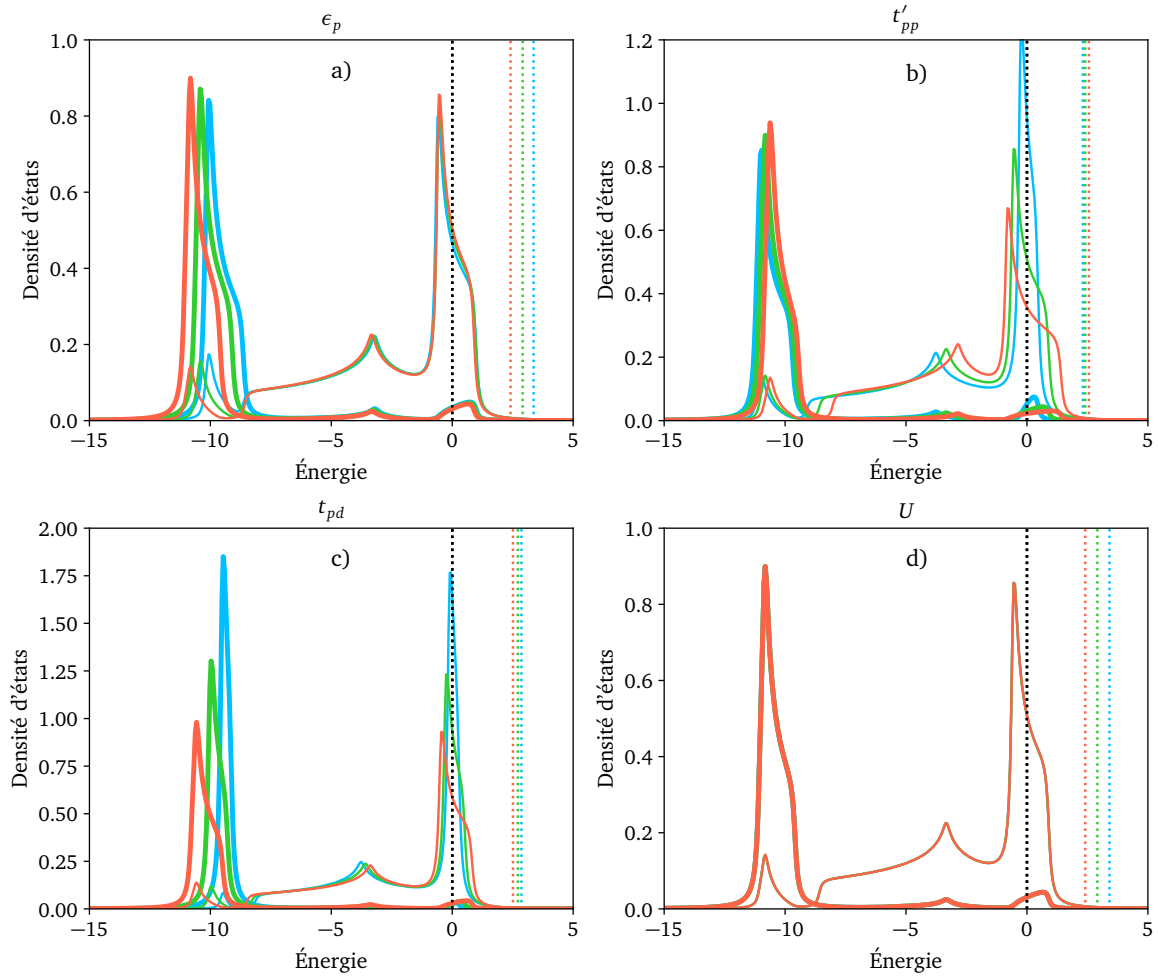


FIGURE 3.9 – Plusieurs densités d'état tracées pour différents ensembles de paramètres dans le modèle sans interaction. Je me suis placé dans des régimes de paramètres proches du point de départ (1.4). Comme d'habitude maintenant, je ne change qu'un seul paramètre à la fois. Pour chaque graphe, il y a trois couleurs correspondant à la valeur maximale du paramètre d'ordre à $\beta = 60$ que l'on trouve en utilisant le solveur. Le rouge correspond à la valeur la plus haute, puis vient le vert et enfin le bleu. Les paramètres changés sont : a) $\epsilon_p \in \{8, 8.5, 9\}$ b) $t'_{pp} \in \{1.2, 1.0, 0.8\}$ c) $t_{pd} \in \{0.7, 1, 1.3\}$ et d) $U \in \{12, 12.5, 13\}$. Pour la figure traitant de U , les trois courbes sont superposées, car U n'apparaît pas dans la résolution du modèle sans interactions. Les figures sont expliquées plus en détail dans le texte en (3.1.3)

Prolongement analytique

Après cette étude du modèle sans interactions, je vous propose de passer à l'étude des densités d'états totales en tenant compte de U . Comme précisé précédemment, ces densités ne sont pas obtenus directement par CT-Seg-3B. Pour les obtenir, j'utilise Ω Maxent [46], qui permet de prolonger les fonctions de Green sortantes du programme. Comme Ω Maxent est

fait pour travailler avec des fonctions de Green scalaires et correspondant à un poids spectral, je ne peux pas prolonger analytiquement la fonction de Green matricielle totale. En effet, les termes du type $\langle \mathcal{T}_\tau c_1^\dagger(\tau) c_2 \rangle$ ne peuvent pas s'écrire sous la forme :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\omega)}{i\omega_n - \omega} \quad (3.3)$$

avec A réelle et positive. Seuls les termes diagonaux peuvent s'écrire avec certitude sous cette forme.

Je ne donne donc au programme de continuation analytique que la partie $G_{\uparrow\uparrow\text{CuCu}}(i\omega_n)$ de la matrice, à savoir le coefficient $_{1,1}$ de la matrice 24×24 sur l'impureté. Pour plus de précisions, je prends plutôt la moyenne des termes diagonaux sur les sites de cuivre de l'impureté. Je donne cette fonction de Green au programme qui se charge ensuite de calculer la fonction de Green dans l'espace des fréquences réelles. Je présente les résultats sur la figure 3.10.

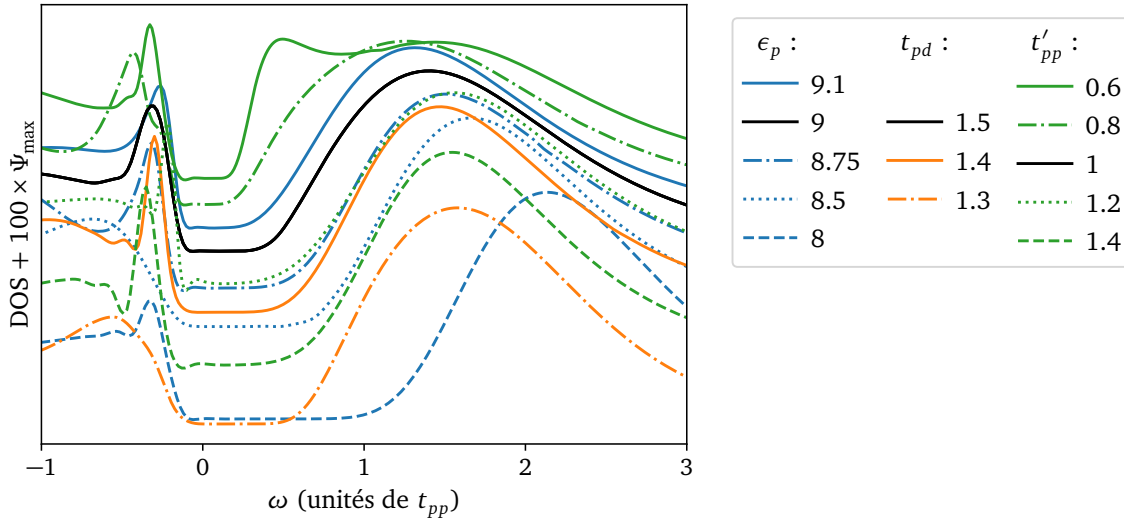


FIGURE 3.10 – Gaps de transfert de charge dans la densité d'états du cuivre prise au demi-remplissage pour plusieurs ensembles de paramètres. Ces densités d'états ont été obtenues en prolongeant analytiquement les fonctions de Green sur les sites de cuivre, à l'aide du programme Ω Maxent [46]. L'axe des ordonnées est un peu modifié pour rendre compte de la réduction du gap de transfert de charge avec le paramètre d'ordre maximal. La valeur du paramètre d'ordre choisie est la valeur maximale obtenue du côté dopé en trous pour l'ensemble de paramètres microscopiques indiqué. L'axe des abscisses a également été modifié pour aligner le début du gap sur toutes les courbes.

Avant de décrire la figure, je veux discuter du choix de μ pour les courbes que je présente. En effet, la densité d'états avec interaction change avec le potentiel chimique. Rien n'indique donc que la taille du gap de transfert de charge ne change pas avec μ . Il se trouve cependant que la densité d'états ne varie pas quand le potentiel chimique est situé dans le gap de transfert de charge. Les courbes que je présente sur la figure se situent dans ce régime. Pour vérifier

cela, observez qu'il n'y a pas de petit pic résiduel au sein du gap, ce que l'on retrouve quand on prend un point à proximité du gap et non à l'intérieur.

Ensuite, j'ai aligné les débuts de gap pour pouvoir comparer facilement leurs tailles. Enfin, il faut bien comprendre que chaque courbe présente bien un gap et que la densité d'états tombe à 0 au sein de ce gap. Cependant, pour pouvoir visualiser l'effet du paramètre d'ordre sur le gap, je décale chaque courbe vers le haut. Ce décalage est proportionnel au paramètre d'ordre maximal du dôme supraconducteur côté dopé en trous pour les paramètres microscopiques correspondant à la courbe. De cette façon, je peux dégager une corrélation entre paramètre d'ordre maximal et taille du gap de transfert de charge. J'observe très clairement que le gap de transfert de charge diminue en taille à mesure que le paramètre d'ordre augmente.

Cette corrélation n'est encore une fois pas totale, comme en témoignent les deux courbes les plus basses qui présentent une valeur du paramètre d'ordre similaire, mais des gaps très différents. On remarque que la relation entre le gap de transfert de charge et le paramètre d'ordre est proche de celle qu'avait le paramètre d'ordre avec le dopage sur les sites d'oxygène. En réalité et nous le montrons dans la référence [15], le dopage sur les sites d'oxygène et le gap de transfert de charge sont très corrélés. Cela peut se voir avec des arguments simples que je présente dans la partie (3.4.3).

3.2 Température critique

Maintenant que j'ai étudié en détail le comportement du paramètre d'ordre avec l'occupation sur les sites d'oxygène, il est temps de passer à la température critique. Celle-ci est obtenue ici comme précisé dans l'introduction de ce chapitre, en observant la disparition du paramètre d'ordre lorsque l'on augmente la température du système.

3.2.1 Disparition du paramètre d'ordre

Je présente alors sur la figure 3.11b les dômes supraconducteurs en fonction des dopages sur les sites de cuivre et d'oxygène. Je rappelle également sur la figure 3.11a les résultats expérimentaux pour pouvoir les comparer. Ces dômes sont obtenus en interpolant le paramètre d'ordre en fonction du dopage et de la température sur une grille régulière¹³. Par convention, et pour éviter des problèmes de convergence, je suppose que les points pour lesquels le paramètre d'ordre est inférieur à $\Psi = 0.002$ ne sont pas dans la phase supraconductrice. En effet, le paramètre d'ordre présente une convergence très lente aux limites de la phase supraconductrice et ne tombe jamais à zéro. Il faut donc un critère pour pouvoir séparer les deux phases. Ce critère est le même que celui utilisé dans la référence [19].

J'observe une grande similitude des résultats entre les deux figures. Je rappelle que les énergies (et donc également les températures) sont en unités de t_{pp} qui selon [18] est de l'ordre de 0.65 eV dans la plupart des cuprates. Une température de 0.02 correspond donc à $0.02 \times 0.65 \text{ eV} = 1.3 \times 10^{-2} \text{ eV} \approx 150 \text{ K}$. Cela correspond effectivement à l'ordre de grandeur de la plus haute température critique des cuprates. On observe cependant que les températures critiques théoriques sont légèrement supérieures aux températures réelles.

Les dômes théoriques sont donc relativement proches des dômes expérimentaux et s'échelonnent de la même façon selon le dopage sur les sites d'oxygène. En s'intéressant à l'empreinte

13. car je le rappelle, je ne peux contrôler que le potentiel chimique

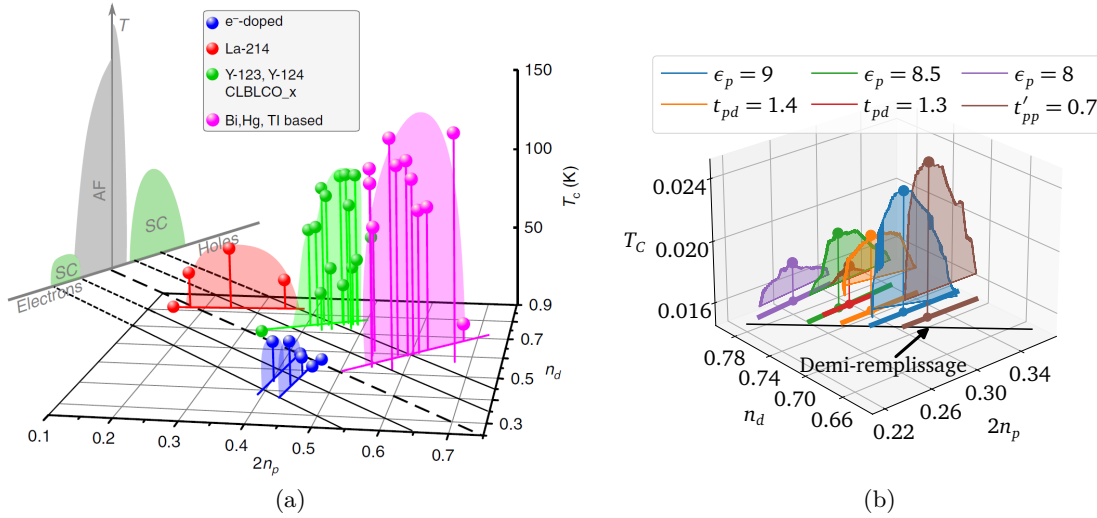


FIGURE 3.11 – Graphe 3D représentant les dômes supraconducteurs en fonction des dopages sur les sites de cuivre et d’oxygène. La figure a) est simplement une reproduction de la figure présente dans [2] et utilisée ici pour comparer aux résultats théoriques. La figure b) représente différents dômes correspondant à des paramètres différents à proximité du point de départ (1.4).

des dômes sur le plan $(2n_p, n_d)$, je remarque cependant que les dômes théoriques sont circonscrits dans une petite zone du graphe expérimental, autour de la courbe rouge correspondant au Lanthane. Je remarque également que l’occupation de cuivre ne varie pas beaucoup au sein d’un même dôme. Cela correspond encore au comportement de la courbe rouge, mais beaucoup moins aux autres, pour lesquels le dopage sur les sites de cuivre diminue à mesure que le matériau s’éloigne du demi-remplissage¹⁴.

Après avoir remarqué que les résultats se cantonnaient dans cette région autour de la courbe rouge, j’ai également remarqué que la zone correspondant à la courbe rose sur le graphe théorique n’était pas accessible en utilisant des paramètres autour de (1.4). En effet, en gardant toujours la même stratégie de ne changer qu’un paramètre à la fois, les paramètres pour lesquels ces valeurs de dopage atomique sont atteintes ne présentent pas de dôme supraconducteur, car se situent après le régime d’hystérèse¹⁵. Les paramètres choisis (1.4) ne sont donc pas exactement représentatifs de la réalité des cuprates.

3.2.2 Correction avec la rigidité superfluide

Depuis le début de ce mémoire, je ne m’intéresse qu’au paramètre d’ordre pour déterminer le dôme supraconducteur et observer des corrélations avec les autres observables du programme CT-Seg-3B. Cependant, il a été montré que la supraconductivité dans les cuprates ne dépend pas uniquement de la présence de paires de Cooper dans le matériau. En

14. Cette dernière observation est beaucoup plus visible sur la figure 2 de la Ref. [47] qui présente les mêmes données, mais projetées sur le plan des occupations.

15. Voir 3.4

effet, en réalité le paramètre d'ordre possède une amplitude et une phase.

$$\Psi = |\Psi|e^{\theta}. \quad (3.4)$$

Et cette phase est primordiale, car elle indique qu'il est possible de définir une phase macroscopique et conduit à une certaine cohérence de phase dans le matériau. Il faut donc tenir compte de cette cohérence de phase pour pouvoir déterminer la température critique réelle du modèle [48, 49]. Cette correction peut heureusement se calculer grâce à la fonction de Green déjà déterminée par le programme CT-Seg-3B¹⁶.

Définition

J'introduis alors la rigidité superfluide ρ_s qui est la quantité qui relie un changement de phase dans l'état supraconducteur à un changement d'énergie libre du système. On a la relation approximative :

$$F_s = \frac{\rho_s}{2} \int_V (\nabla \theta)^2 \quad (3.5)$$

où \int_V correspond à une intégrale sur tout le matériau (θ est une fonction de la position au sein du matériau). Cette relation un peu bizarre, faisant intervenir la phase supraconductrice, peut se comprendre avec des arguments simples. On voit ici qu'à une rigidité superfluide ρ_s fixée, une phase supraconductrice variant beaucoup au sein du matériau entraîne un gain en énergie. Revenons un peu à l'analogie des spins d'Ising que j'avais empruntée plus haut pour introduire la méthode Monte-Carlo. Dans un tel système, les spins ont tendance à s'aligner¹⁷ avec leurs voisins. Et il leur coûte une certaine énergie de ne pas rester aligner. Un système dans lequel le spin varie beaucoup sera donc pénalisé en énergie. Ici, c'est exactement la même chose à deux détails près :

- On suppose que la fonction θ varie lentement par rapport à la taille de la maille élémentaire. On peut donc considérer le système comme continu à l'échelle de la fonction θ . La somme sur les sites devient alors une intégrale sur le volume.
- La fonction θ est une fonction à valeurs réelles et non pas uniquement dans $\{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$. Il ne s'agit donc pas exactement du même mécanisme, on ne pénalise pas une différence de signe entre deux valeurs de la fonction θ sur des sites voisins, mais une variation de la fonction - donc le gradient au carré. Dans les deux cas, une variation de la fonction considérée amène une plus grande énergie.

Cette analogie, je l'espère, aide à comprendre l'origine de ce terme d'énergie due à un changement dans la phase supraconductrice. L'expression de ρ_s est, elle, plus compliquée à obtenir et je vous dirige vers la référence [49] pour voir la manière dont on la dérive formellement. Je présente également une version du calcul pour un modèle à plusieurs bandes en 4.3.2.

16. Ou en tout cas une approximation de cette correction

17. ou à s'anti-aligner suivant la valeur des paramètres du modèle, mais je considère le cas $J > 0$ dans lequel les spins ont tendance à s'aligner.

Rapport à la température critique

En reprenant l'expression de l'énergie libre F_s , on voit qu'avec un ρ_s grand, même un petit changement de phase dans le matériau conduit à un grand changement de l'énergie libre. De cette expression, on peut déduire que plus ρ_s est grande, plus la phase sera uniforme dans le système. Comme ρ_s peut-être calculé - plus ou moins simplement - à partir de la fonction de Green, il faut un critère pour décider ce que veut dire « ρ_s assez grand pour autoriser la supraconductivité». Il se trouve qu'il suffit de trouver les points dans le diagramme de phase qui vérifient

$$\rho_s = \frac{2}{\pi}T \quad (3.6)$$

pour trouver la frontière supraconductrice associée à la cohérence de phase [50]. Dans cette partie, j'appellerai les températures qui vérifient ce critère les températures de Kosterlitz-Thouless¹⁸ - T_C^{KT} - et les températures critiques trouvées selon le critère du paramètre d'ordre les températures champ moyen - T_C^{CDMFT} . Pour la suite, le critère retenu sera alors

$$\rho_s(T) \geq \frac{2}{\pi}T \quad (3.7)$$

pour un point à la température T à l'intérieur du dôme supraconducteur. On a donc maintenant deux critères pour déterminer la frontière supraconductrice. Ces deux critères doivent bien sûr être respectés en même temps pour que la supraconductivité se manifeste réellement. On remarque cependant qu'il n'est pas possible d'avoir une cohérence de phase sans la présence de paires de Cooper¹⁹. Je peux donc en réalité ne conserver que ce deuxième critère pour déterminer les dômes supraconducteurs.

Je trace sur la figure 3.12 les deux températures critiques T_C^{KT} et T_C^{CDMFT} pour les mêmes paramètres que 3.11b. J'y observe que les dômes de T_C^{KT} sont plus bas que les dômes obtenus avec le critère du paramètre d'ordre, j'ai donc moins d'information sur la phase supraconductrice que je ne croyais. De plus, ils semblent tous décalés vers la droite des graphes. C'est effectivement ce que j'attendais de la rigidité superfluide, à savoir qu'elle corrige la présence de la supraconductivité proche du demi-remplissage. La pente des dômes proche du demi-remplissage est ainsi moins abrupte, ce qui rend les dômes un peu moins asymétriques.

Malheureusement et à cause du problème de signe, je suis limité quant à la température que je peux atteindre dans les simulations. Pour beaucoup de points, il n'est donc pas possible d'atteindre des températures assez basses pour respecter le critère 3.7. Je ne peux donc pas obtenir directement la température de transition de Kosterlitz-Thouless pour ces points. On voit ça bien sur la figure 3.12 pour $t_{pd} = 1.3$, dans laquelle T_C^{KT} n'est jamais accessible.

Cependant, il est tout de même possible dans ce cas de trouver une borne inférieure à la température critique. Pour cela, je me place à un dopage fixe et je remarque que pour toute température T_0 à l'extérieur du critère 3.7 - et donc supérieure à T_C^{KT} , la température définie par :

$$\begin{aligned} T_{min} &\equiv \frac{\pi}{2}\rho_s(T_0) \\ &\leq \frac{\pi}{2}\rho_s(T_C^{KT}) \\ &\leq T_C^{KT} \end{aligned} \quad (3.8)$$

18. Ce nom vient bien sûr des personnes qui ont introduit cette correction dans [48]

19. Heureusement, le calcul fait en (4.112) observe bien ce critère

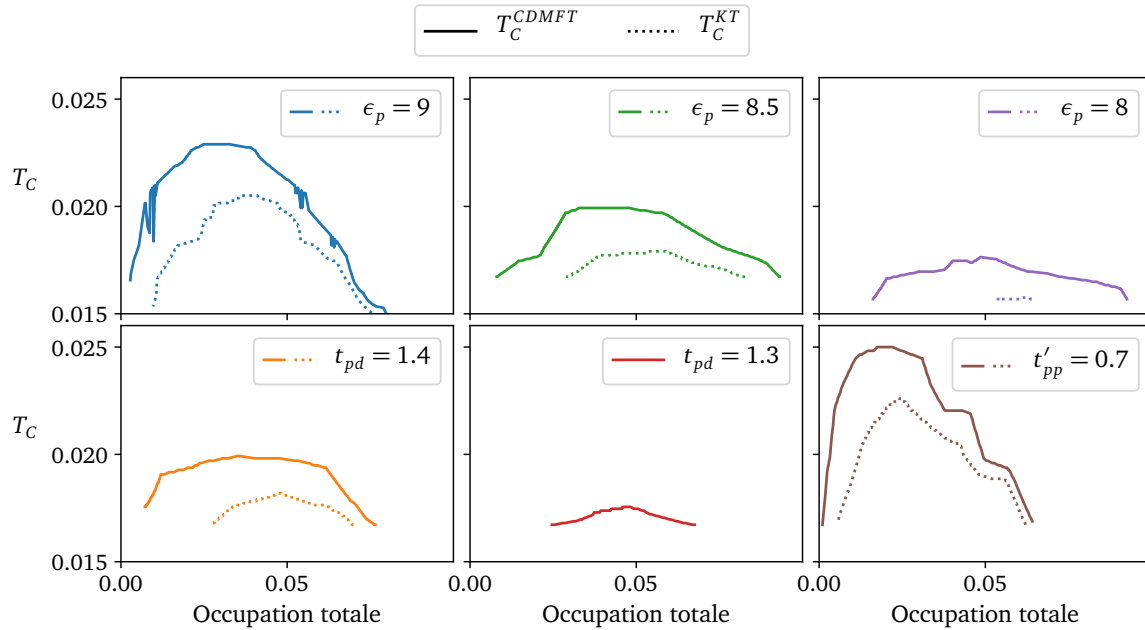


FIGURE 3.12 – Comparaison entre les températures critiques KT et CDMFT en fonction du dopage total pour différentes valeurs de paramètres. Pour $t_{pd} = 1.3$, la rigidité superfluide est toujours trop petite pour arriver au critère 3.7. Il n’y a donc pas de frontière T_C^{KT} .

est plus petite que la température de transition. Ce raisonnement vient du fait que je suppose que la rigidité superfluide est une fonction décroissante de la température à dopage fixé. J’illustre graphiquement ce raisonnement dans la figure 3.13.

Armé de ces différents critères et approximations, je trace sur la figure 3.14 la véritable température critique en fonction du dopage sur les sites d’oxygène et de cuivre de la même façon qu’en 3.11b, mais en deux dimensions cette fois. Les dômes en traits pleins sont donc moins complets que ceux obtenus en ne tenant compte que du paramètre d’ordre. Je trace alors en ligne pointillée la limite inférieure calculée grâce au critère (3.8). Je remarque cependant que les deux types de dômes pointillés reprennent bien la corrélation avec le dopage sur les sites d’oxygène trouvé pour le paramètre d’ordre et T_C^{CDMFT} . Une étude approfondie de la rigidité superfluide serait nécessaire pour pouvoir conclure correctement sans les approximations de borne inférieure faites ici. Cela nécessiterait cependant un programme sans problème de signe à cette température ou bien des temps de calcul bien plus conséquents.

3.3 Occupations et potentiel chimique

3.3.1 Occupations sur les sites atomiques

L’article qui a servi de point de départ à ce travail de maîtrise [2], ne donne pas seulement une information sur la dépendance du paramètre d’ordre en fonction des dopages sur les sites oxygènes et cuivres, mais également les différentes dépendances entre ces occupations

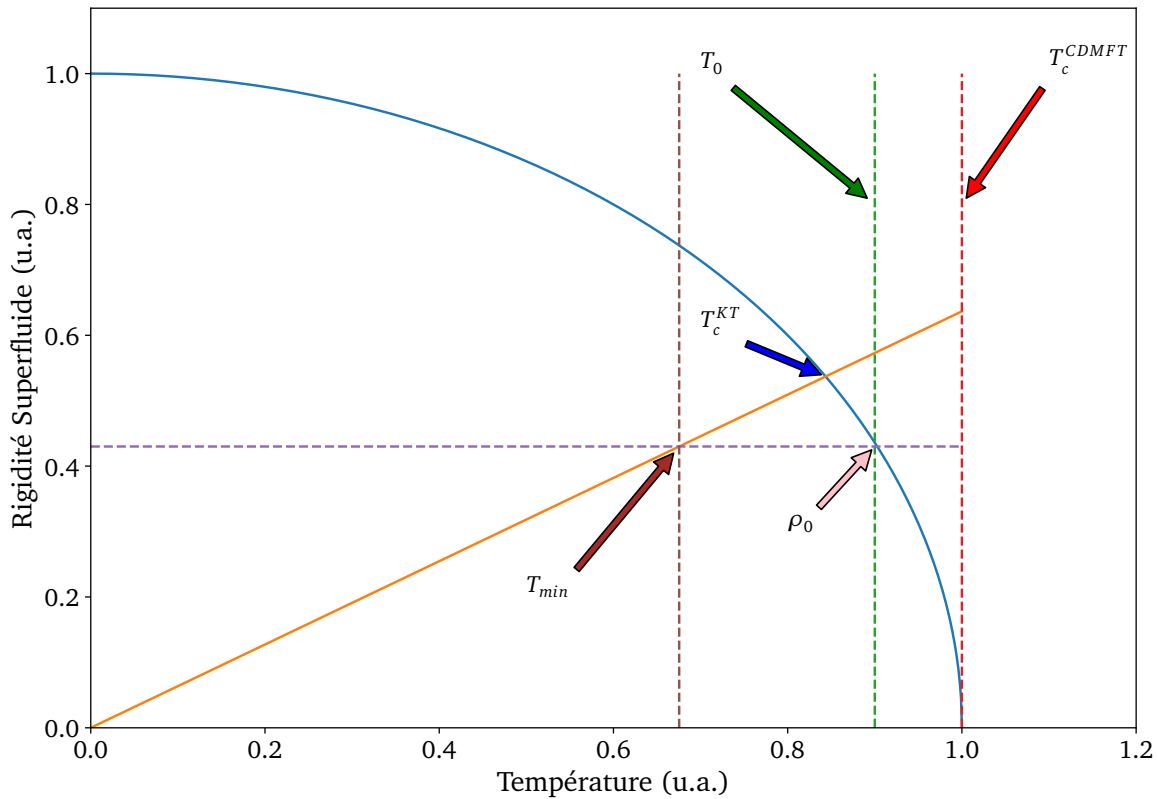


FIGURE 3.13 – Explication des critères liés à la rigidité superfluide (schématisation).

Ce graphe est tracé à dopage constant - le potentiel chimique peut donc potentiellement varier. Je trace en **bleu** la rigidité superfluide en fonction de la température. Je trace en **orange** le critère $\rho_s = \frac{2}{\pi}T$. Leur intersection définit alors la température T_c^{KT} . Si je ne peux pas aller assez bas en température, je peux tout de même obtenir une borne inférieure pour la température de Kosterlitz-Thouless. En effet, si T_0 est telle que le critère du paramètre d'ordre - (3.2.1) - est respecté, mais pas celui de la rigidité superfluide - (3.7), alors $T_{min} \equiv \frac{\pi}{2}\rho_0$ est une limite basse pour la température de transition T_c^{KT} . La rigidité superfluide ρ_s est en unités de $\rho_s(T = 0)$ et la température en unités de T_c^{CDMFT} . La rigidité superfluide tombe à 0 exactement à $T = T_c^{CDMFT}$ (voir l'équation (4.129)).

directement. Ces relations ne sont pas très visibles sur le graphe en trois dimensions, mais une projection de ce graphe sur le plan $(2n_p, n_d)$ est présentée dans [51, 47]. Il est donc possible de comparer ces données à celles que j'ai obtenues. J'ai résumé les données que je trouve dans le régime du dôme supraconducteur²⁰ sur la figure. 3.15. J'observe sur cette figure que les courbes sont très plates du côté dopé en trous et très pentues du côté en électrons. Cela veut dire que le dopage que l'on induit dans le matériau va principalement sur les oxygènes du côté des trous et principalement sur les atomes de cuivre du côté des électrons. Cela rejoint ce que j'avais mentionné plus haut dans ce mémoire. Ensuite, en revenant à la figure 2 de [47], je remarque que mes données correspondent plus ou moins à la courbe **noire** sur le graphe

20. Je discute de ces observables dans le régime d'hystérèse plus loin en (3.4)

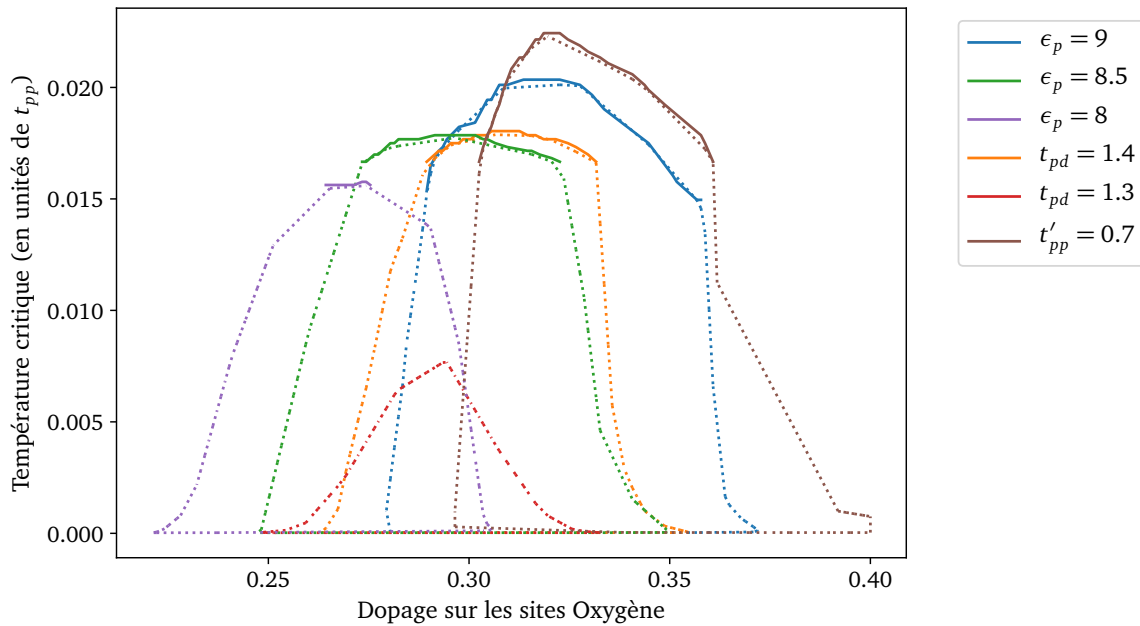


FIGURE 3.14 – Tracé de la température critique en fonction du dopage en trous sur les sites d’oxygène. En trait plein, je trace le critère strictement 3.7. En trait pointillé, je trace la borne inférieure calculée selon la formule 3.8. Comme le critère de T_C^{KT} n’est jamais atteint pour $t_{pd} = 1.3$, le dôme tracé ici - qui n’est qu’une limite basse - est probablement beaucoup plus bas que ne l’est le vrai dôme.

2D - **rouge** sur la figure 3.11a. La principale similitude provient de la pente que l’on observe dans ce graphe. Les valeurs des dopages correspondent également même si elles sont assez disparates pour les différents paramètres.

Pour comprendre d’où vient ce comportement, je vous propose de réfléchir dans la densité d’états autour du demi-remplissage. En reprenant la figure sans interactions de la figure 1.4, on remarque que sous le gap de transfert de charge, se situe directement la bande d’oxygène. Les états juste en dessous du niveau de Fermi sont principalement des états d’oxygène et sont donc les premiers que l’on enlève lorsque l’on dope en trous. Cela correspond à une courbe horizontale dans l’espace $(n_d, 2n_p)$. À l’inverse, au-dessus du gap, se trouve la bande de double occupation du cuivre. En rajoutant des électrons, on a donc tendance à rajouter des états autour des sites de cuivre.

En regardant seulement les occupations fournies dans la référence [47], on pourrait croire que les pentes augmentent à mesure que le dopage en oxygène au demi-remplissage augmente. Les résultats que j’obtiens, malgré leur similitude à la courbe noire de la référence [47] ne vont malheureusement pas dans ce sens, car on observe que la pente au sein du dôme supraconducteur s’aplatit à mesure que le dopage sur les sites oxygène au demi-remplissage augmente. Les pentes à l’extérieur du dôme semblent, elles, augmenter avec le dopage sur les sites d’oxygène, mais cela n’aide pas beaucoup. Les résultats à température nulle de Sidhartha Dash, pour des paramètres réalistes, présentent, eux, des pentes différentes de 0 et plutôt proches des points roses et jaunes dans la référence [47]. C’est d’ailleurs une des différences majeures

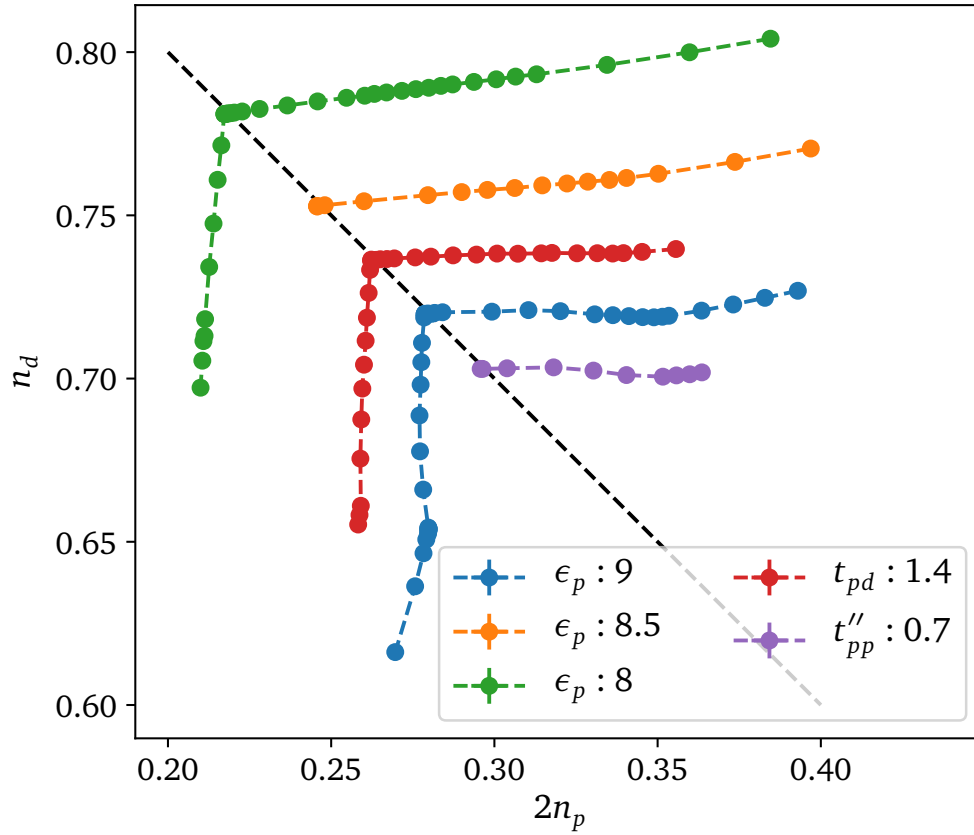


FIGURE 3.15 – Tracé des dopages sur les sites atomiques pour les paramètres dans le régime du dôme supraconducteur. La droite médiane noire correspond au demi-remplissage ($2n_p + n_d = 1$). Pour chaque courbe, un point correspond à un potentiel chimique différent et donc un dopage différent. On observe une grande similitude dans l’allure générale des courbes qui sont très plates autour du demi-remplissage et dont la pente change au niveau de ce qui semble être les limites des dômes supraconducteurs. Pour les paramètres $\epsilon_p = 8.5$ et $t''_{pp} = 0.7$, je n’ai pas tracé le côté dopé en électrons.

entre les deux ensembles de paramètres. Les paramètres réalistes sont donc probablement plus en mesure de simuler le comportement réel des cuprates. Je remarque cependant que les occupations au demi-remplissage trouvées à température nulle ne correspondent pas vraiment aux cuprates et restent autour du dôme rouge sur le graphe en 3D de la figure 1.2. Ces observations me confortent donc dans l’idée que le modèle de Hubbard à trois bandes est capable, dans une certaine mesure, de rendre compte du comportement des cuprates sur ce plan des occupations atomiques.

3.3.2 Relations au potentiel chimique

Comme le Hamiltonien avec lequel je travaille est exprimé dans l’ensemble grand canonique, qui permet de faire varier le nombre de particules dans le système considéré, un terme

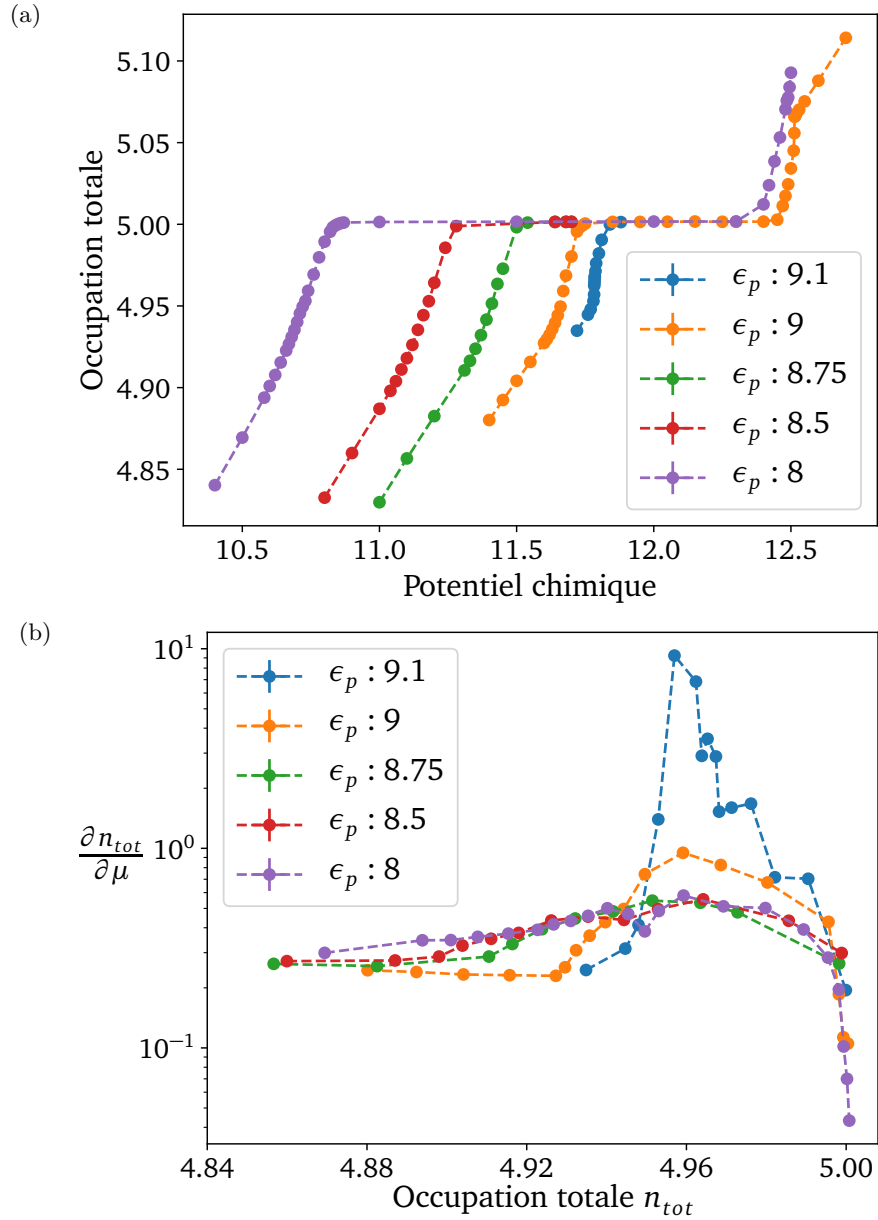


FIGURE 3.16 – (a) Occupation totale dans une maille élémentaire en fonction du potentiel chimique dans l'état supraconducteur. Le régime d'isolant de transfert de charge au demi-remplissage correspond au plateau que l'on peut voir pour tous les paramètres ici. Le plateau est moins large à mesure que ϵ_p augmente. Cette observation se comprend très bien si l'on prend le modèle simplifié, la longueur de ce plateau étant liée à la taille du gap de transfert de charge. (b) Dérivée de l'occupation totale par rapport au potentiel chimique, tracée en fonction de l'occupation totale. Ce graphe permet de mieux visualiser les changements de pente dans le régime dopé en trous. J'ai utilisé une échelle logarithmique pour plus de clarté.

$-\mu N$ est présent, où μ est un multiplicateur de Lagrange appelé le potentiel chimique. Faire varier μ revient à changer l'importance de l'occupation dans le Hamiltonien et donc à l'augmenter ou la réduire. Grâce²¹ au signe moins, en général, il se trouve que le potentiel chimique et l'occupation évoluent dans le même sens. Ici, je vais étudier la relation entre l'occupation totale et le potentiel chimique et voir comment ces relations sont influencées par la présence de la phase supraconductrice. Cela m'amènera à introduire la phase normale dans laquelle je me sépare du paramètre d'ordre.

État supraconducteur Pour commencer, je vous propose de regarder les courbes dans l'état supraconducteur pour une variation de ϵ_p . Sur la Figure 3.16a, je remarque que chaque courbe présente un régime linéaire, puis une augmentation de la pente avant d'atteindre le demi-remplissage et une pente nulle. Il s'agit là du régime d'isolant de transfert de charge. L'augmentation de la pente correspond exactement au départ de la phase supraconductrice qui se termine au demi-remplissage. En se tournant vers la Figure 3.16b, on remarque que pour une variation de la valeur de ϵ_p , la pente maximale ne semble pas changer pour des petits paramètres d'ordre alors qu'à partir de $\epsilon_p = 9$, cette pente augmente très rapidement, se voyant multiplier par presque 2 entre 8.75 et 9, puis par 10 entre 9 et 9.1. Cette augmentation brusque se retrouve pour des changements de tous les paramètres. Seulement, pour t'_{pp} , avant cette augmentation brusque, la pente diminue à mesure que le paramètre d'ordre augmente. Je commente ce comportement spécial plus en détail dans la partie (3.4).

F

État Normal Je veux maintenant comparer ces courbes dans l'état supraconducteur avec ce qu'il se passe dans l'état normal. En effet, comme les pentes des courbes semblent s'accroître quand on entre dans la phase supraconductrice, une analyse dans l'état normal peut indiquer s'il s'agit d'une caractéristique notable. Pour faire des calculs dans l'état normal, je prends exactement le même programme que pour l'état supraconducteur, mais je force le paramètre d'ordre à 0. Comme cette symétrie n'est pas brisée naturellement par le programme²², il suffit d'imposer cette condition au début du cycle d'autocohérence. Dans ce sens, il ne s'agit donc pas d'un état normal naturel. Ce procédé peut rappeler la façon qu'ont les études expérimentales d'appliquer de grands champs magnétiques pour supprimer artificiellement la phase supra et ainsi pouvoir étudier plus en détail les phases avoisinantes à plus basse température. Mais ici, il n'y a pas d'effet secondaire à appliquer un tel champ magnétique, car je supprime seulement la possibilité d'appariement entre les spins up et down. Je trace la relation entre l'occupation totale et le potentiel chimique sur la Figure 3.17.

Je remarque donc dans l'état normal que la pente ne s'accroît pas au moment où celle de l'état supraconducteur le fait quand on augmente le potentiel chimique (quand on va de gauche à droite sur la Figure 3.17). Cette pente reste la même jusqu'au moment où une discontinuité intervient et l'occupation de l'état normal vient dépasser celle de l'état supraconducteur avant de la rejoindre au demi-remplissage. Remarquez alors que si on prend la courbe qui va dans l'autre sens, on observe exactement le même type de phénomène, mais la discontinuité apparaît plus tard. Ce comportement montre bien sûr que le système est plus stable dans le régime supraconducteur que dans l'état normal - car j'ai forcé une symétrie

21. Où à cause, chacun son point de vue

22. Voir 2.1.3

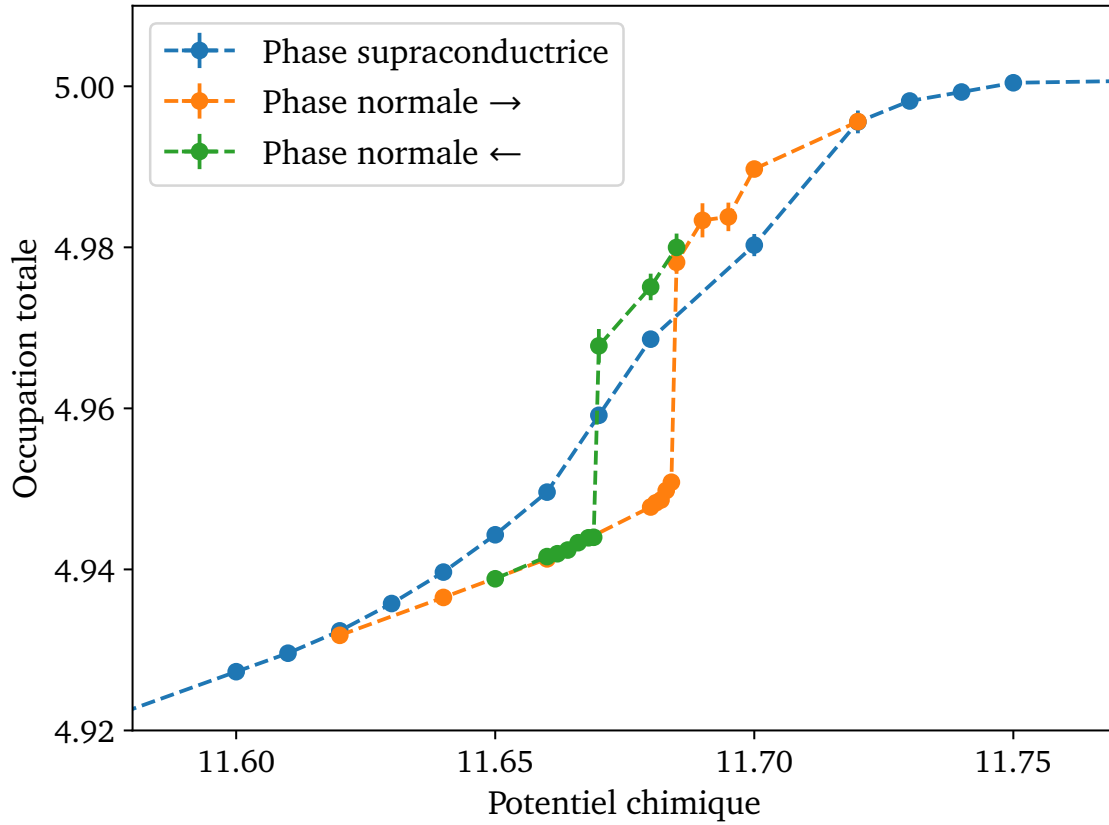


FIGURE 3.17 – Occupation totale dans une maille élémentaire en fonction du potentiel chimique dans l'état supraconducteur et dans l'état normal. La courbe supraconductrice correspond à celle déjà présentée en 3.16a (pour $\epsilon_p = 9$), zoomée sur la région d'intérêt (qui correspond au dôme supraconducteur). Au niveau de ce dôme, l'état normal s'éloigne de l'état supraconducteur (ce qui n'est bien sûr pas possible autrement). On observe dans l'état normal un régime d'hystérèse, qui n'existe pas (ou trop peu pour que ce soit visible) dans l'état supraconducteur.

empêchant l'état supraconducteur pour faire apparaître l'état normal. Cela peut alors faire penser que la transition de premier ordre observée ici avec l'hystérèse est intrinsèquement plus énergétique qu'un régime sans hystérèse. Je montrerai un peu plus tard en 3.6 que ce raisonnement n'a pas vraiment de sens et que l'état supraconducteur est simplement plus stable que l'état normal dans cette région. Enfin, la forme de la décroissance de l'occupation en partant du demi-remplissage et en diminuant le potentiel chimique fait penser à un régime de pseudogap comme indiqué sur la référence [52]. J'en discute brièvement en annexe 4.5.

3.4 Régime d'hystérèse

3.4.1 Occupation et discontinuité

Jusqu'à maintenant, je n'ai discuté que des résultats que je qualifierais d'attendus. Ce sont les résultats que je pensais obtenir en parcourant le diagramme de phase. Je pensais obtenir des corrélations entre l'occupation sur les sites d'oxygène et la température critique, je pensais également trouver d'autres observables reliées au paramètre d'ordre et encore d'autres signatures de la phase supraconductrice. Cependant, je ne pensais pas trouver un régime de paramètres dans lequel le paramètre d'ordre et les autres observables ont des comportements inhabituels, non monotones et discontinus. Je ne pensais pas me retrouver face à des transitions de phases de ce genre ou des hystérèses en plein milieu du dôme supraconducteur. Vous verrez cependant à la fin de cette section que j'aurais dû m'attendre à de tels comportements. En effet, ils étaient déjà observés expérimentalement [53]²³ et théoriquement [23]. J'appelle ce régime le régime d'hystérèse, parce c'est le comportement que l'on y observe pour la plupart des observables.

Localisation Rappelez vous que sur les courbes reliant l'occupation sur une maille élémentaire n_{tot} au potentiel chimique μ , la pente maximale avait tendance à augmenter quand ϵ_p augmentait, pour des grands paramètres d'ordre. Cette pente maximale se situait aux alentours du dopage optimal. Comme on a pu le voir sur 3.16b, l'augmentation de la pente maximale est soudaine et très rapide. Il se trouve que quand on augmente ϵ_p encore plus, la pente prend des valeurs infinies. On observe donc sur la figure 3.18 une discontinuité qui correspond à cette pente quasi infinie. Cette discontinuité est ce que j'appelle le régime d'hystérèse. Pour le moment, ce n'est qu'une discontinuité, alors pourquoi parler d'hystérèse ?

Il se trouve que cette discontinuité correspond à une transition du 1^{er} ordre. En effet, l'énergie libre de Gibbs F présente un terme du type μn_{tot} , donc n_{tot} est la dérivée première de F par rapport à μ . À l'endroit de sa discontinuité, on a alors une transition de premier ordre. Cette discontinuité, comme dans le cas de la discontinuité dans l'état normal au milieu du dôme supraconducteur, va de pair avec une hystérèse. Cette hystérèse est visible sur la figure 3.18. On observe pour plusieurs valeurs de ϵ_p supérieures à 9.1 une hystérèse du même genre. Cet hystérèse, propre à une transition du premier ordre, est en réalité déjà observée dans le modèle de Hubbard à une bande et notamment en [52]. Elle est dans ce cas reliée à la présence du gap de Mott. Ce gap, qui apparaît dans le modèle à une bande pour des grandes valeurs de U , joue en réalité le même rôle que le gap de transfert de charge dans le modèle à trois bandes. Il est donc attendu que le même comportement apparaisse. Il faut cependant noter que l'hystérèse visible ici est dans l'état supraconducteur alors que dans la référence [52], elle est dans l'état normal. Cette transition de premier ordre n'est donc pas cantonnée à l'état normal.

Pour observer cette ressemblance, je regarde la figure 4 de la référence [52]. On voit que les panneaux **e** à **h** correspondent aux résultats que j'obtiens dans le cas supraconducteur. On

23. Dans cet article, ils rapportent des observations cohérentes avec le régime d'hystérèse et la transition de premier ordre que je décris plus bas.

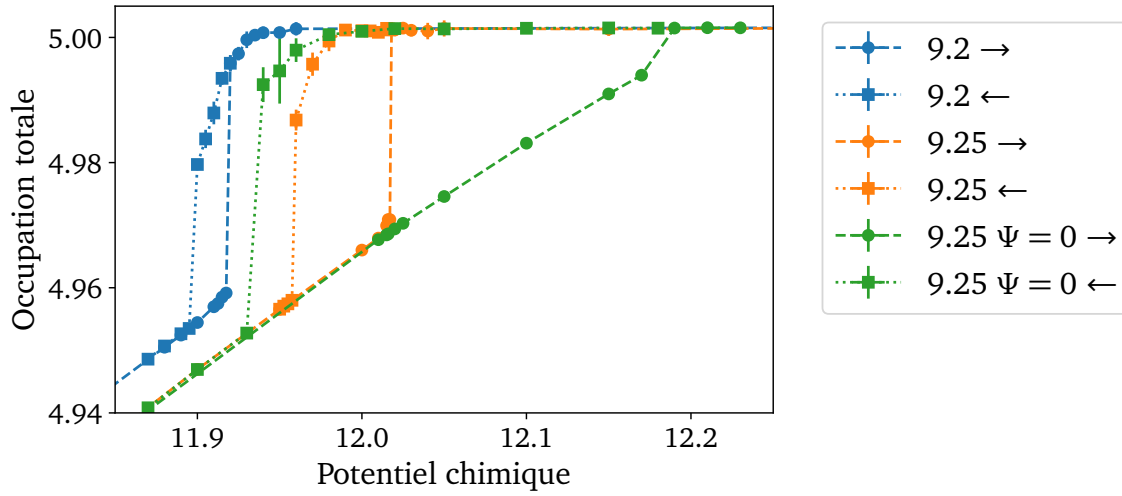


FIGURE 3.18 – Occupation totale dans une maille élémentaire en fonction du potentiel chimique dans l'état supraconducteur. On observe pour ces deux paramètres une hystérèse au niveau où le dôme supraconducteur est censé apparaître. À partir des basses valeurs de μ et en augmentant μ , on observe tout d'abord un régime visiblement affine avant de rencontrer une augmentation de la pente puis une discontinuité. Après la discontinuité, on se trouve dans le régime isolant ou juste avant dans un régime qui ressemble à un régime de pseudogap. Dans l'autre sens, en diminuant le potentiel chimique, on entre dans le régime pseudogap avant de subir la discontinuité et de retomber dans le régime surdopé et affine.

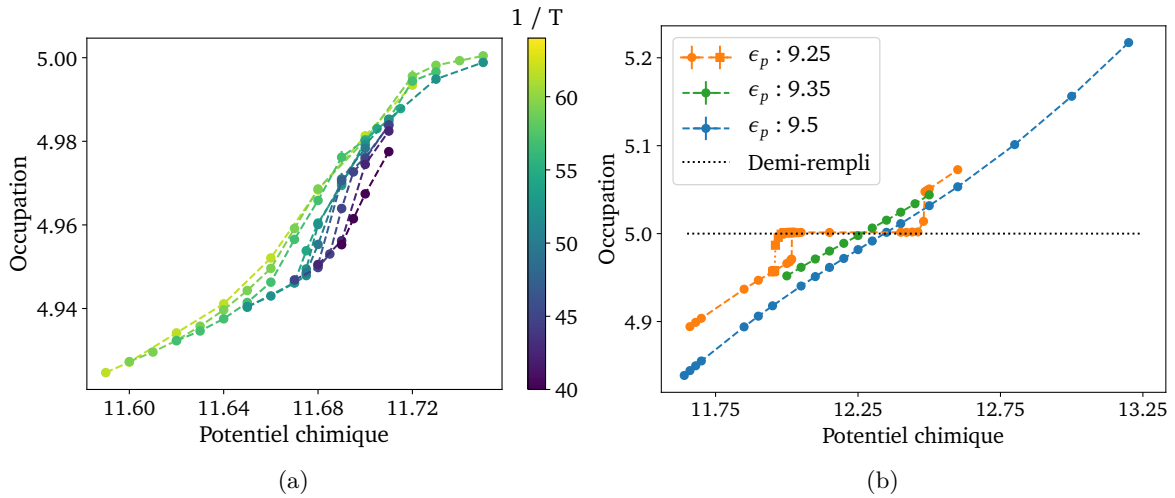


FIGURE 3.19 – Occupation totale en fonction du potentiel chimique. (a) Tracés au point de départ 1.4 pour différentes températures. (b) Tracés pour une augmentation de ϵ_p . On remarque la disparition du plateau autour du demi-remplissage ($n_{\text{tot}} = 5$).

observe d'abord une pente très régulière pour U grand - **h** et **g**. Je retrouve cela et on peut le

voir sur la figure 3.16a pour $\epsilon_p = 8$ par exemple. Ensuite, à mesure que U diminue, je retrouve des changements de pente plus ou moins compliqués dans la phase supraconductrice. En diminuant encore U , je retrouve encore le cadre zoomé de la figure e pour des changements de température (voir Fig. 3.19a). Puis vient le régime d'hystérèse - d à b - avec ses discontinuités plus ou moins marquées. Puis ensuite une courbe quasi linéaire en a, qui ne présente pas de phase isolante au demi-remplissage, ce qui correspond au régime que j'observe en augmentant ϵ_p encore plus (voir Fig. 3.19b). Je rappelle enfin que je me suis concentré sur ϵ_p sur les figures de cette partie, mais que cela s'applique bien pour des variations de tous les paramètres microscopiques du modèle à trois bandes.

État normal et état supraconducteur Je reviens pour cette comparaison à la figure 3.18 sur laquelle je trace pour $\epsilon_p = 9.25$, l'hystérèse dans l'état normal et dans l'état supraconducteur. Je remarque alors que l'hystérèse existe également dans l'état normal et qu'elle est bien plus large que celle dans l'état supraconducteur. Comme si la présence de l'état supraconducteur permettait de régler partiellement le problème de discontinuité²⁴ mais que cela ne suffisait pas et qu'un autre phénomène provoquait une discontinuité résiduelle. Ce comportement se retrouve pour des variations de chaque paramètre microscopique et n'est donc pas cantonné au seul paramètre U comme le présageait le modèle à une bande. La zone de paramètres dans laquelle on retrouve une transition du premier ordre proche du demi-remplissage semble donc plus grande dans l'état normal que dans l'état supraconducteur.

Le cas particulier de t'_{pp} Avant de passer aux autres observables, je veux m'attarder sur le cas de t'_{pp} pour lequel il se passe quelque chose d'un peu différent. En effet, pour introduire le régime d'hystérèse et de discontinuité qui va de pair, j'ai utilisé le fait que la pente de $n_{tot}(\mu)$ augmentait très rapidement juste avant l'apparition d'une discontinuité. C'est également le cas pour ce paramètre autour de $t'_{pp} = 0.5$. Cependant (voir figure 3.20) et contrairement aux autres ensembles de paramètres, en augmentant la valeur de t'_{pp} la pente augmente également. Déjà pour $t'_{pp} = 1.3$, une transition de phase du premier ordre et une hystérèse apparaissent.

Cette deuxième transition n'a pas l'air reliée au gap de transfert de charge, mais à un autre phénomène. Déjà dans la densité d'états sans interaction, dans ce régime de paramètres, on observe l'apparition d'un pic. Ce pic correspond à la bande supérieure d'oxygène qui s'aplatit complètement. Il se s'agit donc pas a priori d'un phénomène autour du gap de transfert de charge. Un aplatissement d'une bande peut entraîner une phase ferromagnétique, mais cela ne semble pas être le cas ici. De plus, l'espace des paramètres après cette transition - pour $t'_{pp} \geq 2.0$ - n'est pas accessible dû à un fort problème de signe. Cela me conforte encore dans l'idée qu'il s'agit là d'une autre phase et que le gap de transfert de charge seul ne permet pas d'expliquer cette transition du premier ordre. Il faut enfin remarquer la spécificité du paramètre t'_{pp} qui est le seul paramètre pour lequel une augmentation ainsi qu'une diminution du paramètre par rapport au point de départ (1.4) mènent tous les deux à la fermeture du gap de transfert de charge²⁵.

Interprétation En se tournant vers le modèle sans interactions, je remarque que le moment d'apparition de ce régime d'hystérèse coïncide plus ou moins avec la disparition graduelle du

24. Comme je l'avais montré en 3.17, autour de valeur de ϵ_p plus petites.

25. Sur la DOS sans interactions en tout cas

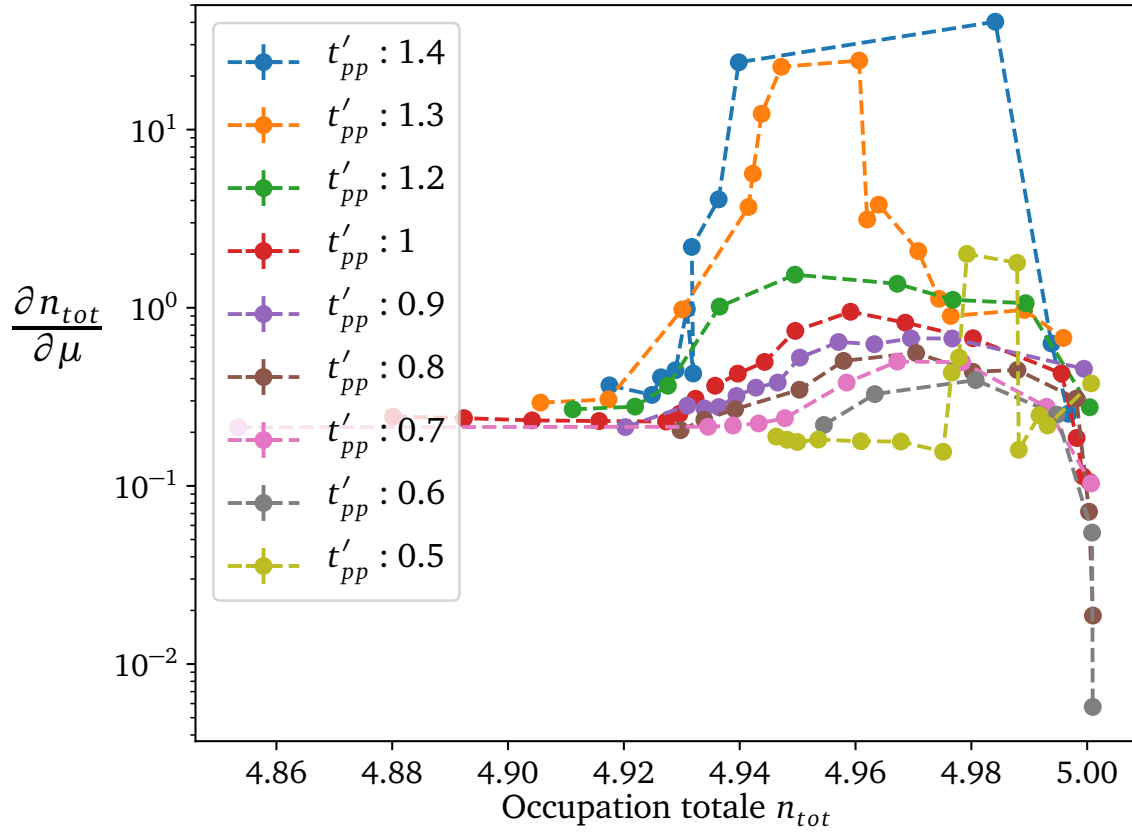


FIGURE 3.20 – Dérivée de l'occupation totale par rapport au potentiel chimique en fonction de l'occupation totale pour des valeurs différentes de t'_{pp} . On observe une décroissance de la dérivée avec t'_{pp} avant une augmentation rapide à 0.5.

gap de transfert de charge. Cela me conforte dans l'idée que la supraconductivité est liée à ce gap et que celui-ci est central dans le comportement général des cuprates.

En continuant à fermer ce gap de transfert de charge, un autre régime radicalement différent apparaît (par exemple pour $\epsilon_p = 9.5$ sur la figure 3.19b). Ce régime ne voit, lui, pas l'apparition de la supraconductivité et il ne comporte également pas de phase isolante, ce qui indique qu'il n'y a plus de gap de transfert de charge dans un tel système²⁶. Je note cependant, une légère inflexion de la courbe $n_{tot}(\mu)$ proche du demi-remplissage, ce qui suggère que le gap de transfert de charge n'est pas encore totalement fermé et qu'une signature de ce dernier subsiste (les bandes ne sont pas complètement superposées). Ce régime n'est pas très intéressant dans l'étude que je fais ici, car il ne présente apparemment pas de changement de phase ni de comportement particulier. Il est cependant intéressant à considérer et permet de mieux comprendre la relation entre toutes ces phases dans le modèle à trois bandes.

26. C'est d'ailleurs pour cette raison que je suppose que le gap de transfert de charge est au centre de ces comportements

3.4.2 Retour aux dômes

Quel est alors l'effet de ce régime sur les dômes supraconducteurs? Des discontinuités dans les graphes $n_{tot}(\mu)$ dans le domaine où on attend de la supraconductivité devraient se traduire par une absence de dôme supraconducteur ou bien des dômes supraconducteurs partiels. En se remémorant ce que j'ai dit un peu plus haut, on a bien à faire à des dômes supraconducteurs étêtés et déformés comme l'atteste la figure 3.21. De plus, pour la plupart de ces points, la convergence est très difficile, ce qui est visible grâce aux grandes barres d'erreur sur les points²⁷. Le paramètre d'ordre étant une des observables qui converge le plus difficilement, et les signes des simulations Monte-Carlo étant très bas dans ces régions, je ne vais pas commenter en plus grands détails la figure.

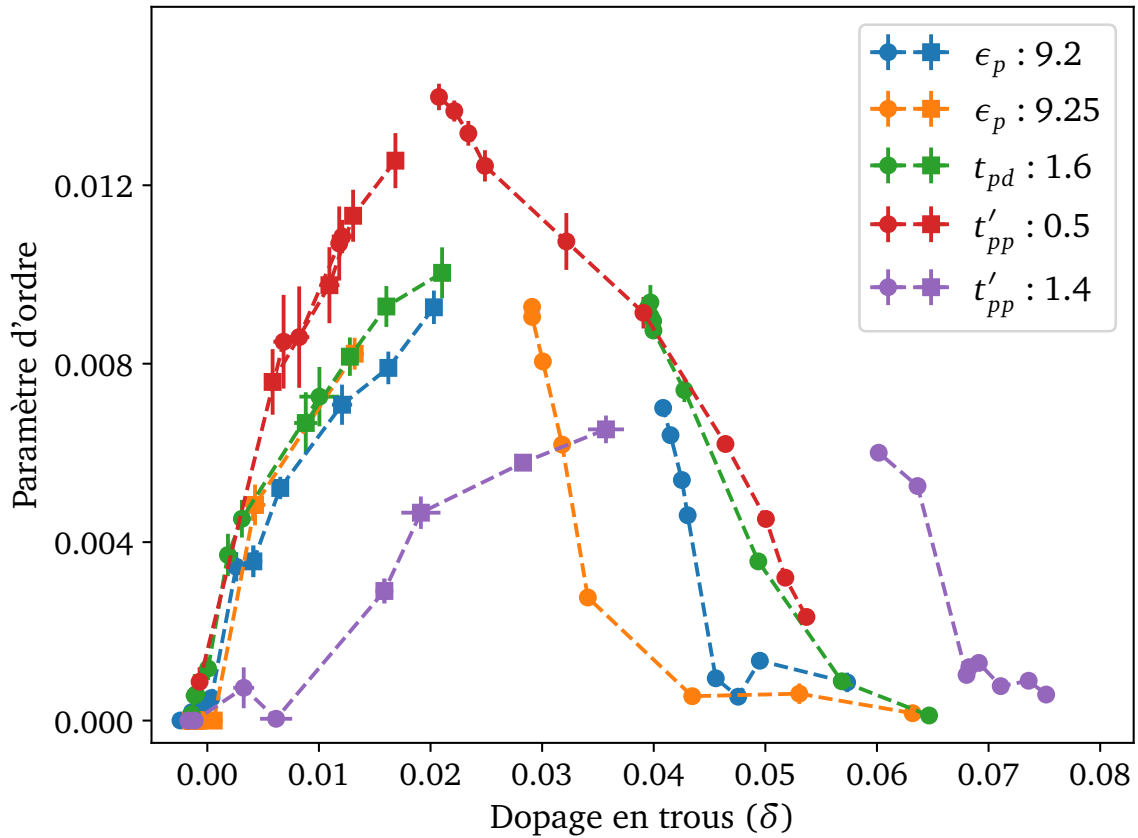


FIGURE 3.21 – Dômes supraconducteurs pour différents ensembles de paramètres dans le régime d'hystérèse. La partie gauche des dômes est obtenue en partant des solutions de demi-remplissage ($\delta = 0$) alors que les parties droites sont obtenues en partant d'états dans le domaine surdopé ($\delta > 0.05$ ici). Chaque dôme est étêté, car certaines valeurs de dopage ne sont pas accessibles, dû à la discontinuité rencontrée.

Ce résultat est cependant à relier à ceux présents dans la Référence [23] dans laquelle, à température nulle, on observe également des dômes en deux parties avec une transition de

27. Notamment proche du demi-remplissage, la proximité de l'isolant n'aidant en rien

phase au niveau du dopage optimal. Ce phénomène est notamment relié au pseudogap dans cet article. Cela peut donc faire penser que le pseudogap a un rôle à jouer dans ce régime d'hystérèse et de discontinuité. Je parle plus en détail du pseudogap en annexe (4.5).

3.4.3 Occupation sur les sites atomiques

Une autre signature notable de ce régime est dans le graphe des occupations sur site. J'ai déjà discuté de ce type de graphe dans les parties précédentes et je vais maintenant me pencher sur le comportement de ces observables dans tous les régimes rencontrés. La figure 3.22 présente ces courbes pour quelques ensembles de paramètres que je trouve représentatifs de tous ces régimes. Dans le régime du dôme supraconducteur, on observe des comportements continus et plus ou moins dérivables (avec quelques points de non-dérivabilité aux frontières des différentes phase). En entrant dans le régime d'hystérèse - $\epsilon_p = 9.25$, on observe un phénomène particulier autour du demi-remplissage. Il y a tout d'abord une petite hystérèse qui apparaît, mais on remarque surtout que le demi-remplissage semble devenir une exception au comportement global de la courbe. Comme si le dopage sur les sites d'oxygène au demi-remplissage changeait à une certaine vitesse avec ϵ_p alors que le reste de la courbe changeait à une autre vitesse. Le comportement intermédiaire entre ces deux tendances (la phase supraconductrice) essaye tant bien que mal de s'adapter à cette différence, mais au bout d'un moment ne suffit plus à accommoder ce changement et une discontinuité apparaît alors. Ensuite, après ce régime de discontinuité, le gap se ferme, le régime d'isolant disparaît avec et la courbe retrouve une allure *lisse*.

Je vais raisonner en termes simples et reprendre le raisonnement utilisé un peu plus haut pour comprendre un peu mieux ce qu'il se passe sur cette figure. Pour ϵ_p petit, tout d'abord, on se retrouve avec une bande d'oxygène bien séparée de la bande de cuivre supérieure (Fig. 3.23 en haut). On a donc un comportement en angle droit au niveau du demi-remplissage, comme je le décrivais en 3.3.1. À l'opposé, si les densités d'état de cuivre et d'oxygène se superposent²⁸ (Fig. 3.23 en bas) on devrait avoir une courbe diagonale sur ce plan. Les résultats de la figure 3.22 se situent donc dans le régime intermédiaire dans lequel la distance entre les deux bandes supérieures est petite et où le comportement n'est plus si simple. Cela vient notamment du fait que la distance entre les bandes de cuivre et d'oxygène est faible et l'hybridation entre les orbitales d'oxygène et de cuivre forte (Fig. 3.23 au milieu). Et ce régime correspond exactement à celui où la phase supraconductrice apparaît. On comprend alors par ce graphe que la supraconductivité n'apparaît pas dans les cas extrêmes ou asymptotiques, mais dans les cas médians dans ce modèle. De plus, cette figure permet de voir la corrélation entre gap de transfert de charge et dopage sur les sites d'oxygène. En effet, on y voit que plus le gap est grand, plus le dopage sur les sites d'oxygène au demi-remplissage est faible.

La supraconductivité apparaît alors entre un régime métallique et un régime isolant. On observe bien que le régime d'isolant - ici de transfert de charge - est nécessaire à l'apparition de la supraconductivité. En effet, on observe une disparition simultanée des phases isolante et supraconductrice. Cette observation rejoint celles faites dans la littérature, que ce soit théoriquement ou expérimentalement [54, 55, 56]. Enfin, on remarque que les différentes occupations n'ont pas un comportement monotone lorsque l'on augmente le potentiel chimique²⁹. On ne peut donc pas expliquer le comportement du système uniquement avec une représentation

28. et sont idéalement réparties

29. En suivant les pointillés de droite à gauche

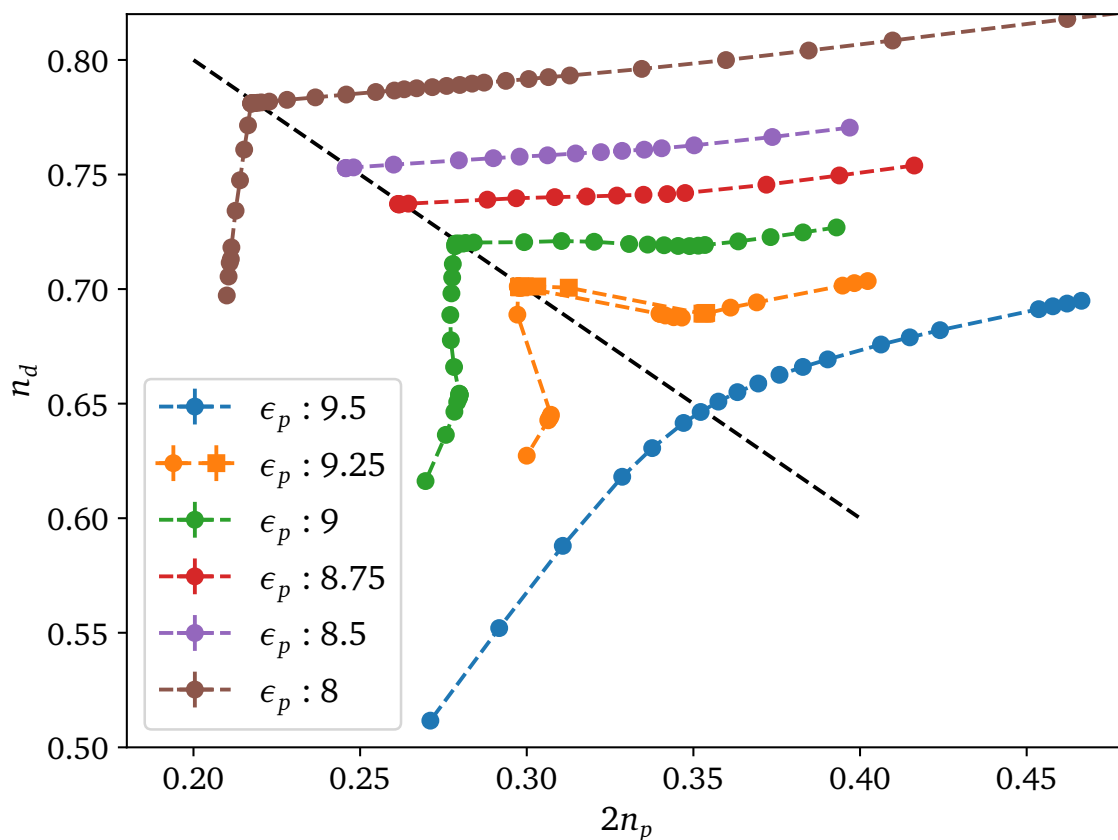


FIGURE 3.22 – Dopages sur les sites atomiques dans les différents régimes. Je n’ai pas tracé le côté dopé en électrons pour $\epsilon_p = 8.5$ et 8.75 . On observe des comportements très différents dans les trois régimes. Pour $\epsilon_p = 9.25$, je trace l’hystérèse avec des points différents, on voit cependant que les deux courbes sont très proches.

en termes de bandes fixées comme je le fais dans la figure 3.23. En réalité - dans un système avec interaction - la densité d’états change avec le potentiel chimique et les occupations individuelles peuvent donc décroître avec le potentiel chimique.

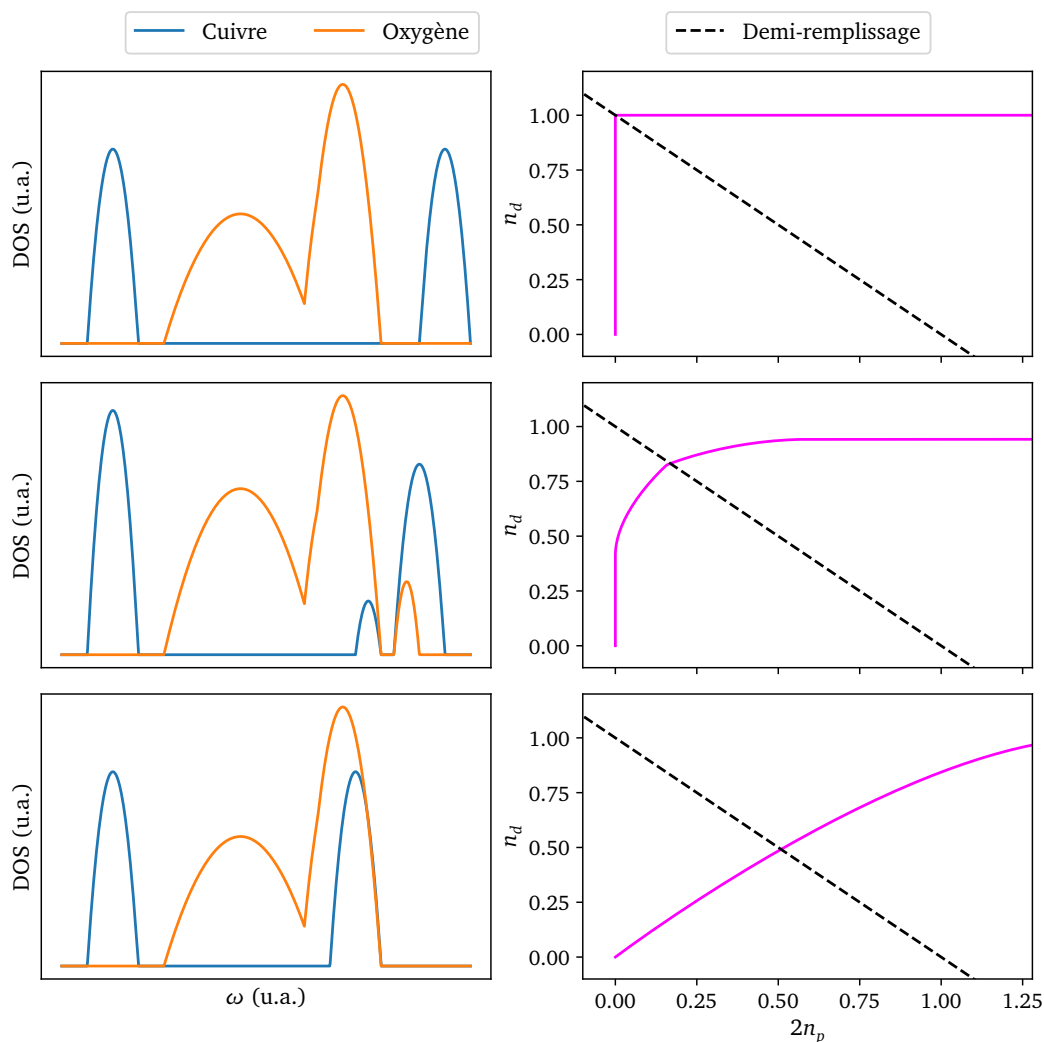


FIGURE 3.23 – Schéma simplifié pour simplifier la compréhension des relations entre les occupations. Je trace sur la colonne de gauche la densité d'états en fonction de l'énergie pour 3 situations différentes. Sur la colonne de droite, on peut voir le dopage sur les sites de cuivre en fonction du dopage sur les sites d'oxygène correspondant à la densité d'état à gauche. Cette figure illustre l'effet du gap de transfert de charge sur les relations entre les dopages.

- La première ligne représente une situation idéale où le gap de transfert de charge est grand : pas d'hybridation entre les bandes.
- La deuxième ligne représente une situation classique en présence d'un gap de transfert de charge. Les bandes ne sont plus purement des orbitales.
- La troisième ligne correspond à une situation où le gap de transfert de charge est complètement fermé.

3.5 Autres observables

Je présente dans cette partie le comportement de quelques autres observables qui ont des comportements notables dans les simulations.

Double occupation

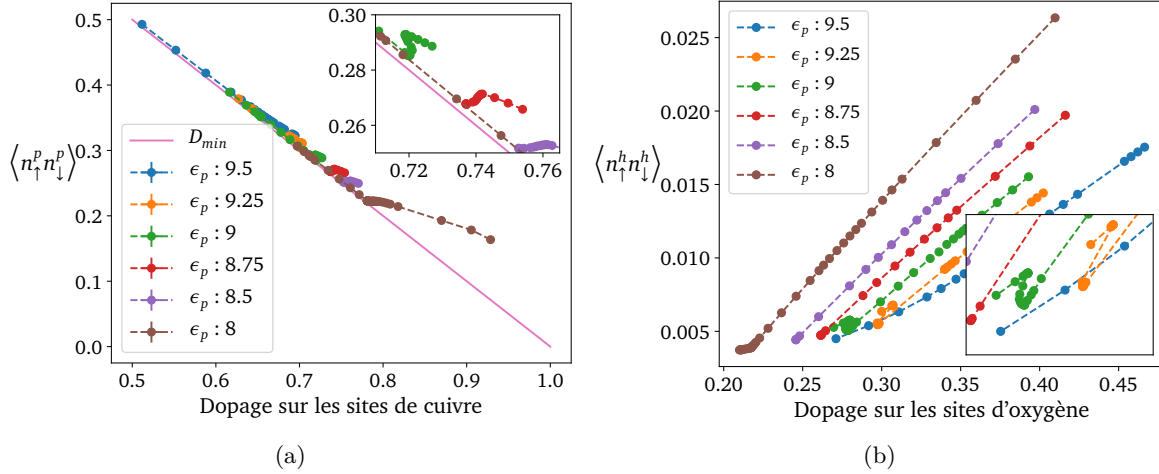


FIGURE 3.24 – (a) Double occupation sur les sites de cuivre $\langle n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d \rangle$ en fonction du dopage en trous sur les sites de cuivre. (b) Double occupation en trous sur les sites de cuivre (voir eq. 3.12) en fonction du dopage sur les sites d'oxygène D_{\min} correspond à la limite théorique de la double occupation donnée en 3.12.

La double occupation a pour expression :

$$D = \langle n_{\uparrow}^d n_{\downarrow}^d \rangle. \quad (3.9)$$

Je n'ai accès qu'à la double occupation sur les sites de cuivre, à cause du solveur d'impureté qui ne considère les sites d'oxygène qu'à travers la fonction d'hybridation. Cette observable correspond donc à la proportion de sites de cuivre qui présentent deux électrons. Or, le seul terme d'énergie potentielle dans le Hamiltonien étant le terme d'interaction Coulombienne sur les sites de cuivre, $U \times D$ donne exactement l'énergie potentielle par maille élémentaire. Sur la figure 3.24a, je trace alors la double occupation en fonction de l'occupation en cuivre. En diminuant le dopage sur les sites de cuivre tout d'abord, on observe d'abord un régime dans lequel la double occupation augmente avec l'occupation sur les sites de cuivre. Au bout d'un certain moment, la courbe change brutalement de pente et toutes les courbes semblent rejoindre la même limite. Le fait que cette limite soit commune à tous les paramètres me fait penser qu'il s'agit d'une limitation théorique. En effet, toutes les courbes semblent suivre

parfaitement la limite donnée par une double occupation en trous nécessairement positive :

$$\langle n_{\uparrow}^p n_{\downarrow}^p \rangle = \langle (1 - n_{\uparrow}^h)(1 - n_{\downarrow}^h) \rangle \quad (3.10)$$

$$= 1 - \langle n_{\uparrow}^h + n_{\downarrow}^h \rangle + \langle n_{\uparrow}^h n_{\downarrow}^h \rangle \quad (3.11)$$

$$= 1 - \langle 1 - n_{\uparrow}^p + 1 - n_{\downarrow}^p \rangle + \langle n_{\uparrow}^h n_{\downarrow}^h \rangle \quad (3.12)$$

$$\geq \langle n_{\uparrow}^p + n_{\downarrow}^p \rangle - 1 \quad (3.13)$$

où n^p est le nombre d'occupation de particules et n^h est le nombre d'occupation de trous. Le domaine d'étude est aux alentours de 1.3 électrons par atome. À ce stade, il est normal d'avoir une double occupation minimale, chaque électron ne pouvant pas être tout seul autour de son atome. Cependant, comme la valeur de U est grande, il est très défavorable pour deux électrons de se situer sur le même site. Les électrons vont avoir tendance à se séparer le plus possible et atteindre cette limite théorique. J'observe cependant que pour de grandes valeurs du dopage sur les sites de cuivre, la limite n'est pas atteinte. Cela implique que la grande valeur de U ne pousse pas nécessairement les électrons à être loin les uns des autres dans tous les régimes de dopage, comme on aurait pu le supposer.

En réalité - et c'est déjà un peu perceptible sur la figure - j'observe une petite déviation à cette limite théorique. En traçant la distance à la courbe théorique - qui est égale en réalité à la double occupation en trous, selon l'équation (3.12) - en fonction du dopage sur les sites d'oxygène j'observe qu'elle dépend en réalité des paramètres de la simulation. Puis je remarque une relation pseudolinéaire entre la double occupation en trous et le dopage sur les sites d'oxygène. Ce régime apparaît seulement du côté dopé en trous et proche du demi-remplissage. Cela n'est cependant plus le cas loin du demi-remplissage³⁰ et du côté dopé en électrons.

Ensuite, je m'intéresse aux régimes intermédiaires des figures 3.24a et 3.24b. En effet, pour les deux graphes, je présente en encart la zone correspondant à un dôme supraconducteur. Sur la figure 3.24a, il s'agit du dôme côté dopé en trous alors que sur la figure 3.24b, il s'agit du côté dopé en électrons. Je remarque alors que les régimes intermédiaires surviennent aux mêmes endroits que les dômes supraconducteurs. Cependant, sur chaque figure, on ne voit qu'un seul tel régime intermédiaire. Je conclus donc que chaque dôme supraconducteur est lié à un retour en arrière d'une double occupation. Cependant, cette observation se fait également dans le régime normal, je ne peux donc pas relier ce comportement de la double occupation directement à la phase supraconductrice. Il s'agit plutôt d'une zone générale anormale dans laquelle la supraconductivité apparaît.

Susceptibilités de spin

Dans le modèle à une bande, la température critique se voit supprimée par le paramètre U et est ainsi proportionnelle au paramètre $J = 4\frac{t^2}{U}$, l'énergie de super-échange. Cela mène à penser que la supraconductivité est fortement liée aux fluctuations de spin. De plus, alors que dans la supraconductivité conventionnelle, la force d'appariement passe par le cristal et ses phonons, certains travaux [56, 57, 58] la relient dans les cuprates aux fluctuations de spin. Il se trouve qu'il est possible de calculer des susceptibilités de spins dans CT-Seg-3B.

30. Je ne l'ai pas montré sur la figure pour des raisons esthétiques.

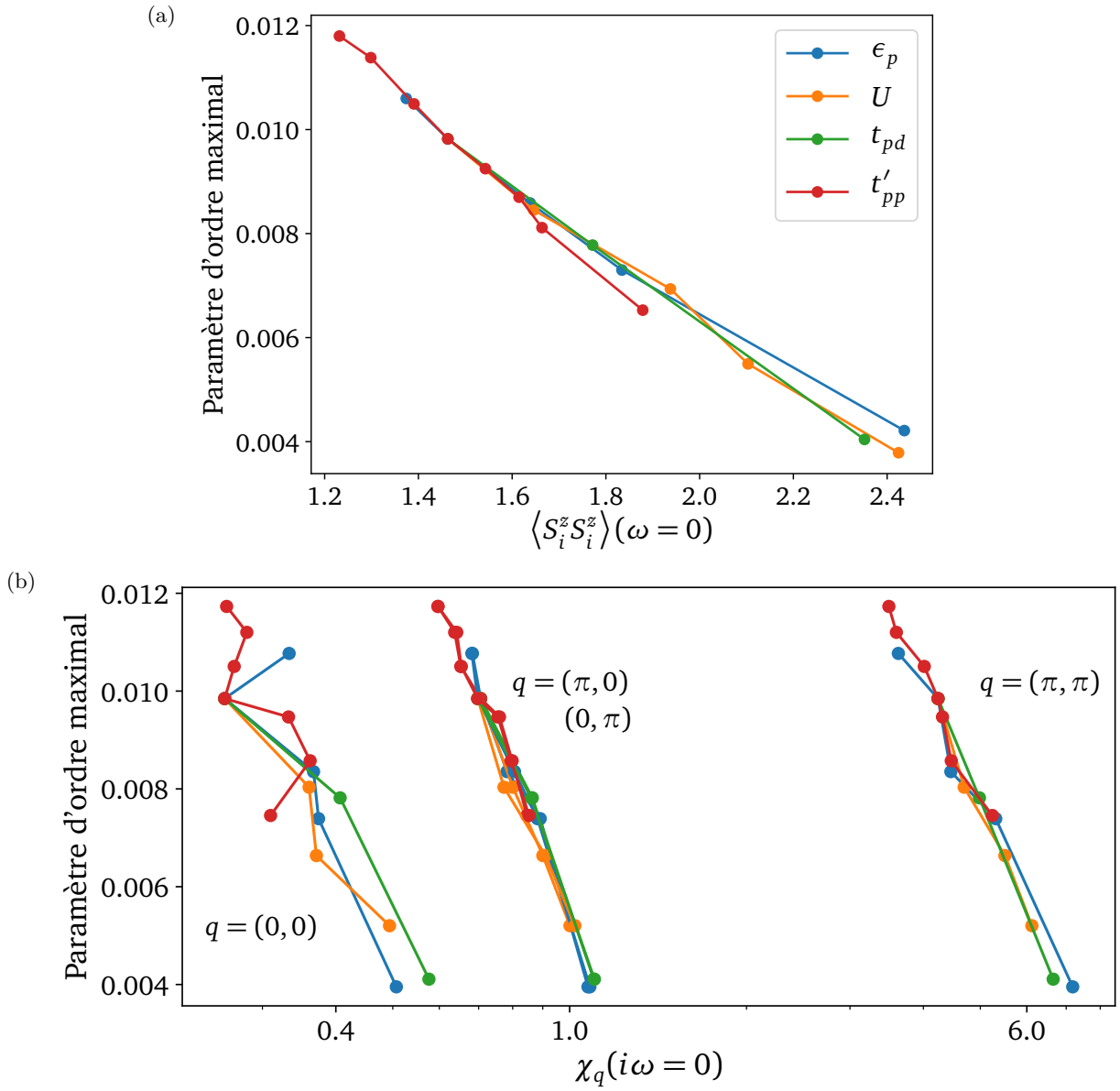


FIGURE 3.25 – Paramètre d'ordre maximal en fonction des susceptibilités de spin. (a) Susceptibilité sur site. (b) Susceptibilité non locale. Comme l'impureté a 4 sites, on a 4 vecteurs de réseau réciproque. On observe que la susceptibilité à (π, π) est beaucoup plus élevée que les autres.

La quantité d'intérêt est généralement la susceptibilité totale du système, c'est-à-dire une quantité du type :

$$\chi_q(\omega = 0) = \langle S_{\text{tot}}^z(\mathbf{q}) S_{\text{tot}}^z(-\mathbf{q}) \rangle \quad (3.14)$$

$$S_{\text{tot}}^z(\mathbf{q}) = \sum_j e^{-i\mathbf{q}j} S_j^z$$

où j'ai noté S_j^z le spin au site j . $\chi_q(\omega = 0)$ est en réalité simplement la transformée de Fourier³¹ de la famille des $\langle S_i^z S_j^z \rangle$ pour i et j des indices de site de cuivre. En effet, comme le solutionneur d'impureté est seulement sur les cuivres, je ne considère que les spins et les corrélations sur ces sites.

Cependant, pour les principaux résultats que j'ai obtenus, je n'avais accès qu'aux $\langle S_i^z S_i^z \rangle$. En effet, seules ces corrélations de spin étaient implémentées au moment où j'ai récupéré le programme CT-Seg-3B. Je présente donc sur la figure 3.25a le paramètre d'ordre maximal en fonction de la susceptibilité sur site. On remarque une très bonne corrélation entre les deux quantités, même meilleure que le dopage sur les sites d'oxygène. La petite déviation pour des variations de t'_{pp} sur les points les plus à gauche correspondent aux dômes non complets obtenus pour des valeurs de t'_{pp} trop grandes (voir 3.4.1). Comme les dômes sont étêtés, la valeur maximale du paramètre d'ordre est un peu plus basse que si le dôme avait été complet.

Intrigué par cette forte corrélation, j'ai recalculé la susceptibilité totale sur l'amas pour les points où le maximum du paramètre d'ordre est atteint. Encore une fois, il est possible d'accéder à de telles observables dans la représentation segment, car les spins des sites individuels s'obtiennent facilement. Je ne présente que la susceptibilité à fréquence nulle, mais CT-Seg-3B est capable de calculer la susceptibilité sur les fréquences de Matsubara bosoniques, que j'ai ajouté en m'inspirant des formules (40) et (41) de [32]³². Je présente ces résultats sur la figure 3.25b. On y observe encore une bonne corrélation entre paramètre d'ordre et susceptibilités à $(\pi, 0)$ ³³ et (π, π) . La susceptibilité à $(0, 0)$, elle, présente beaucoup moins de corrélations. Cela est sûrement dû au fait que cette susceptibilité est beaucoup plus petite et varie très rapidement avec l'occupation totale, par rapport aux autres susceptibilités. Prendre seulement la susceptibilité optimale pour une quantité qui varie beaucoup est donc un peu trompeur, notamment à cause du faible nombre de points que j'ai obtenu pour décrire les dômes supraconducteurs. J'observerais une meilleure corrélation entre les deux quantités si je prenais plus de points au sommet des dômes supraconducteurs.

Enfin, je remarque que la susceptibilité à (π, π) est la plus importante sur l'amas - d'un facteur 6 environ par rapport à celle à $(\pi, 0)$. Cela indique bien que la phase antiferromagnétique n'est pas loin et que les fluctuations de spins - si elles jouent un rôle - ont un caractère antiferromagnétique.

Équation d'Eliashberg et susceptibilité particule-particule

Ensuite, dans le but de regarder le dôme supraconducteur d'un autre oeil, je me suis tourné vers la susceptibilité particule-particule de l'état normal. En effet, il s'agit de la quantité qui permet de savoir si le matériau, en présence d'une perturbation extérieure, aura tendance à former des excitations entre deux particules. La supraconductivité étant intrinsèquement liée à la formation de paires de Cooper, ce genre d'excitations est au centre de la phase supraconductrice. Il est possible d'obtenir une approximation de cette susceptibilité de paires en partant de la susceptibilité χ_q présentée précédemment et calculée dans le solutionneur d'impureté. Je ne présente pas le calcul théorique permettant d'obtenir cette quantité et je vous renvoie vers la Référence [59] et son matériel supplémentaire qui le détaille.

31. en considérant une symétrie par translation.

32. Qui n'est pas bien définie pour $i\omega = 0$, mais qui fonctionne en réalité en remarquant que $\lim_{i\omega \rightarrow 0} \frac{e^{i\omega\tau_{l+1}} - e^{i\omega\tau_l}}{i\omega} = \tau_{l+1} - \tau_l$

33. Qui est la même que celle à $(0, \pi)$, car je considère une symétrie selon les axes x et y

Je cherche plus spécifiquement à savoir quand cette susceptibilité diverge. En effet, si elle diverge, toute petite perturbation extérieure va entraîner une excitation de paire dans le système. Cela indique donc le début de la phase supraconductrice. En regardant le point où la susceptibilité diverge, il est alors possible de trouver une nouvelle frontière supraconductrice. Je comparerai ensuite cette nouvelle frontière à celle obtenue avec l'ancienne définition pour vérifier que la phase supraconductrice provient effectivement d'excitations de paires. Comme la susceptibilité de paire est de la forme :

$$\frac{\chi_{pp}^0}{1 - \Gamma\chi_{pp}^0} \quad (3.15)$$

il suffit de repérer le moment où $\Gamma\chi_{pp}^0$ atteint 1. Cette quantité étant une matrice, les limites de la phase supraconductrice correspondent au moment où sa plus grande valeur propre atteint 1.

Je calcule alors la plus grande valeur propre³⁴ de cette matrice - qui s'appelle le facteur de Stoner - dans l'état normal au point de départ et à différentes températures et je trace cela sur la figure 3.26.

On y observe que le facteur de Stoner diminue bien avec la température à une occupation fixée, ce qui est rassurant, la supraconductivité devant disparaître au-dessus de T_C . Ensuite, on voit que toutes les valeurs trouvées sont supérieures à 1, qui était censée être la valeur à partir de laquelle on se trouvait dans la phase supraconductrice. On a donc un problème.

En réalité dans les formules (S11) et (S12) du matériel supplémentaire de la référence [59], il faut prendre pour Γ_0 la valeur $U_s \leq U$ du potentiel de Coulomb écranté. J'ai supposé $U = U_s$, ce qui n'est pas le cas habituellement, car je n'avais pas de moyen de déterminer une valeur pour U_s . Cela a pour effet d'augmenter la valeur du facteur de Stoner. Je ne peux donc pas conclure sur une nouvelle frontière supraconductrice.

Cependant, cette étude me permet de distinguer entre deux comportements. Le premier est celui que l'on observe pour de grandes valeurs de dopage. On y voit comme le début d'un dôme, qui augmente avec l'inverse de la température. Les points maximaux supposés de ces dômes³⁵ ne correspondent pas vraiment aux sommets des dômes supraconducteurs. Cependant, le comportement général attendu est bien là : le facteur de Stoner - et donc la susceptibilité de paire - diminue avec le dopage et avec la température.

Ensuite, j'observe une cassure aux alentours d'un dopage de 4%. Le facteur de Stoner est beaucoup plus petit pour des dopages inférieurs à cette valeur. Cela indique une différence de mécanisme entre les deux côtés du dôme, la partie sous-dopée présentant une susceptibilité de paire inférieure à la partie surdopée, à U_s fixée. Cette différence pourrait également venir du fait que la valeur de U_s pourrait être dépendante du dopage et changer radicalement entre le sous-dopé et le surdopé. Ces observations rejoignent la pensée communément acceptée que les mécanismes responsables de la supraconductivité sont différents dans les deux régimes.

Puis, à ces valeurs propres maximales sont en réalité associés des vecteurs propres dans l'espace $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, i\omega_{n1}, i\omega_{n2})$. Ces vecteurs propres permettent d'obtenir des informations sur la symétrie des excitations de paire. Sur la figure 3.27, je trace les parties réelles et imaginaires des vecteurs propres à différentes valeurs de l'occupation pour $\mathbf{k}_2 = 0$ et $i\omega_{n2} = 0$. Je remarque une symétrie $d_{x^2-y^2}$ pour des valeurs de l'occupation dans le régime surdopé. En effet, si je

34. La plus grande valeur propre en valeur absolue est souvent négative. Il faut donc bien prendre la plus grande valeur propre positive.

35. Les dômes n'étant pas complets ici, leur sommet n'est pas très clairement défini

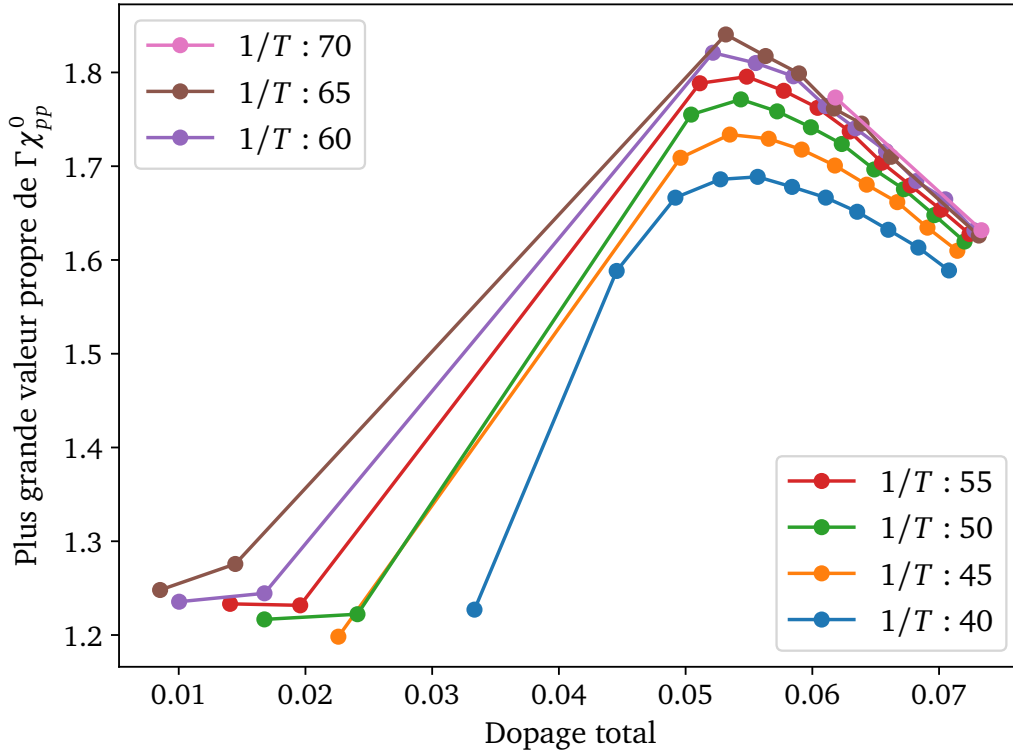


FIGURE 3.26 – Facteur de Stoner en fonction de l’occupation totale au point de départ (1.4) pour quelques valeurs de la température dans l’état normal. Le facteur de Stoner est la plus grande valeur propre de $\Gamma\chi_{pp}^0$. Pour les paramètres choisis dans cette figure, le dôme supraconducteur est complet. Le comportement de l’occupation avec le potentiel chimique est celui présenté dans la figure 3.17.

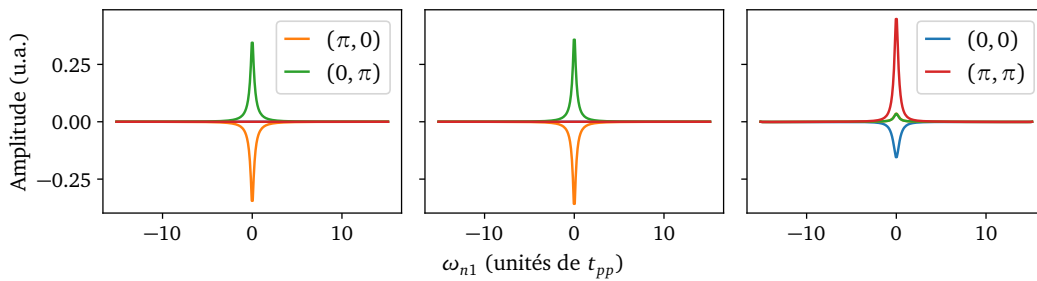


FIGURE 3.27 – Amplitude du vecteur propre associé au facteur de Stoner pour les 4 valeurs de \mathbf{k} sur l’amas. Ces courbes correspondent à $\beta = 60$ et sont obtenues pour trois valeurs de l’occupation différentes, respectivement 4.93, 4.94 et 4.99. J’observe que la troisième courbe présente des symétries bien différentes. Dans les deux premières figures, les courbes bleue et rouge sont confondues. Dans la troisième, les courbes orange et verte sont confondues.

passe une telle symétrie dans l'espace réciproque, je récupère des composantes à $(0,0)$ et (π,π) nulles tandis que les composantes à $(0,\pi)$ et $(\pi,0)$ sont opposées. Les excitations de paires ont donc une symétrie $d_{x^2-y^2}$ du côté surdopé, ce qui est rassurant et confirme que mon choix des symétries du paramètre d'ordre est justifié. Ensuite, du côté sous-dopé j'observe que la symétrie des vecteurs propres est radicalement différente. La composante à (π,π) domine maintenant alors que les trois autres composantes sont pratiquement nulles. Cette domination indique la présence de fluctuations antiferromagnétiques. Ce résultat semble être indépendant de la valeur de U_s , donc la différence entre ces deux comportements ne peut pas s'expliquer par la valeur de U_s uniquement. L'expression de $\Gamma\chi_{pp}^0$ que j'ai utilisée pour ce calcul étant seulement une approximation, il est possible que du côté sous-dopé, elle ne suffise plus et qu'il faille tenir compte de corrections de vertex différentes. Cela peut notamment venir du fait que la région sous-dopée dans l'état normal est un régime de pseudogap. Ce pseudogap dominerait alors en l'absence de supraconductivité et changerait la symétrie des fluctuations de paires.

3.6 Phase antiferromagnétique

Jusqu'ici, je n'ai pas du tout parlé de la phase antiferromagnétique qui est pourtant une des phases les plus importantes du diagramme de phase à côté de la supraconductivité près du demi-remplissage. Cela est visible sur la Figure 1.1b, bien sûr. Le fait est que j'imposais des symétries dans le programme CT-Seg-3B pour ne pas considérer cette phase et me concentrer sur la phase supraconductrice. Tout au long de ma maîtrise, la question de cette phase, que j'ai volontairement oubliée alors qu'elle influence très fortement la supraconductivité (notamment du côté dopé en électrons), m'est beaucoup revenue et ce n'est qu'à la fin du projet qu'elle m'a paru abordable et intéressante. Je vous donne donc dans cette partie une impression de son effet et je laisse à de futurs étudiants le soin de continuer ce travail pour aller plus en profondeur dans le modèle à trois bandes.

Pour la phase supraconductrice, il était nécessaire d'introduire manuellement un paramètre d'ordre non nul pour permettre au système de s'équilibrer dans un tel état. Il devrait en être de même pour l'état antiferromagnétique. Si on part d'une solution au problème qui est symétrique de spin, le système a besoin d'une petite perturbation pour entrer dans un état antiferromagnétique ou son inverse. On peut voir ça en revenant à la petite balle en 2.3, qui, si elle démarre en $x = 0$, a besoin d'une petite perturbation pour tomber dans l'un ou l'autre des puits à ses côtés. Il se trouve que ce n'est pas le cas ici et que la simulation Monte-Carlo, en raison de son côté stochastique, permet de briser la symétrie spontanément. J'ai donc besoin de moins de précautions lorsque je circule dans le diagramme de phase pour cette phase antiferromagnétique qui se manifeste toute seule.

J'ai pu étudier le comportement du système dans cette nouvelle symétrie à trois endroits de l'espace des paramètres. J'ai commencé par regarder ce qu'il se passe au point de départ ($\epsilon_p = 9$) pour avoir une idée de l'influence de la phase supraconductrice sur la supraconductivité. Je me suis ensuite concentré sur le régime d'hystérèse ($\epsilon_p = 9.25$) qui est bien différent du régime du dôme supraconducteur comme on a vu précédemment. J'ai enfin vérifié l'existence d'une phase antiferromagnétique au-delà du régime d'hystérèse ($\epsilon_p = 9.5$).

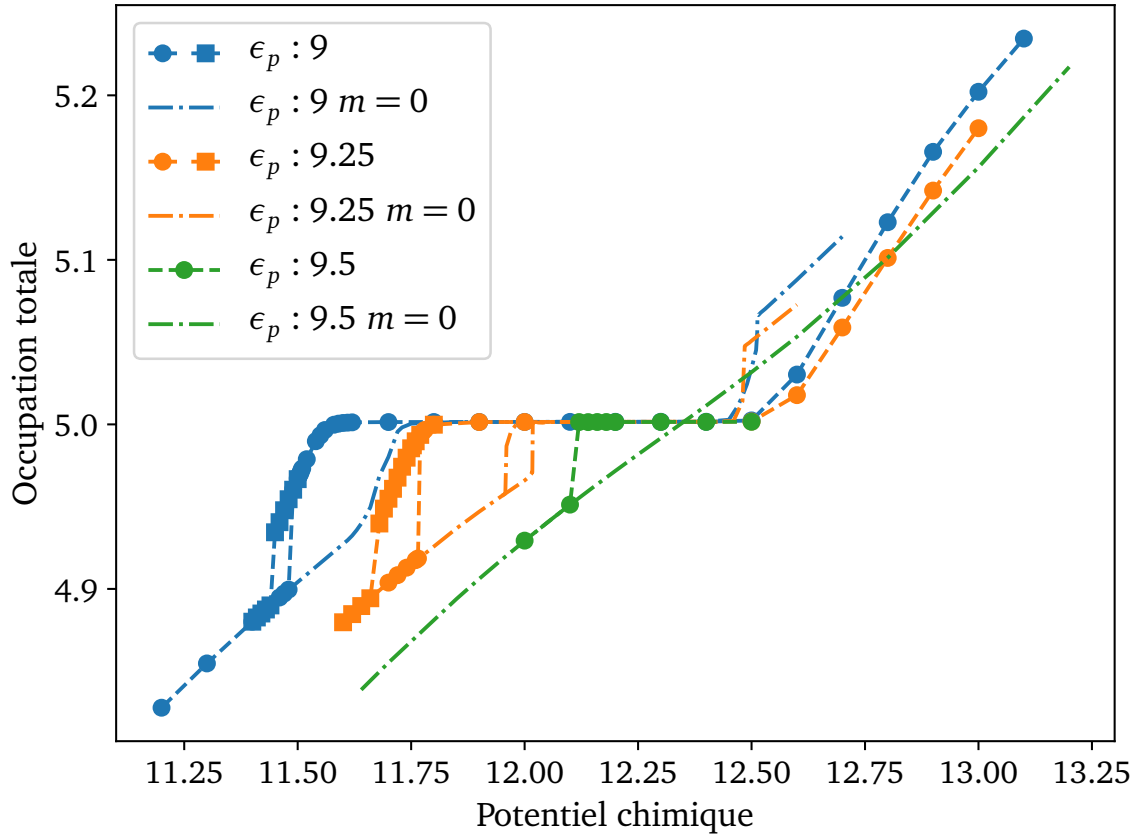


FIGURE 3.28 – Occupation totale par maille élémentaire en fonction du potentiel chimique. Les courbes pointillées sont tracées pour référence et représentent les résultats en l'absence d'état antiferromagnétique pour comparaison. La courbe pour $\epsilon_p = 9.5$ a le même comportement que les précédentes sur les points calculés et montrés ici. J'ai choisi de ne pas calculer des points supplémentaires pour éviter des simulations inutiles.

3.6.1 Point de départ

Au point de départ donc (courbes bleues), la phase supraconductrice disparaît complètement après l'introduction de l'antiferromagnétisme, le paramètre d'ordre supraconducteur converge très rapidement à zéro pour toutes les simulations. Je me concentre alors sur le paramètre d'ordre antiferromagnétique et la relation de l'occupation avec le potentiel chimique que je trace dans la Figure 3.28. Je remarque tout d'abord que les courbes des deux états coïncident dans l'état normal pour des petits potentiels chimiques. Puis, la transition du métal vers l'isolant apparaît plus tôt - avant $\mu = 11.5$ - que dans le cas supraconducteur - plutôt autour de $\mu = 11.6$.

Ensuite, à ce même endroit, on observe une hystérèse. On voit également que la phase isolante - pente de la courbe nulle - est beaucoup plus étendue dans le régime antiferromagnétique. Cela était attendu puisque la phase antiferromagnétique est également une phase isolante et que de précédents résultats dans le modèle à une bande avaient déjà fait cette

remarque [60, 61]. Enfin, du côté dopé en électrons, on n'observe pas de changement brusque de pente sur la courbe ni de régime d'hystérèse contrairement à l'autre côté. Je suppose ensuite que la courbe antiferromagnétique rejoint la courbe à $m = 0$ pour des grands potentiels chimiques³⁶. Le fait que les courbes avec ou sans phase antiferromagnétique soient les mêmes aux deux extrémités de cette figure me conforte dans l'idée que c'est seulement autour du demi-remplissage que des phases compliquées à étudier et expliquer apparaissent.

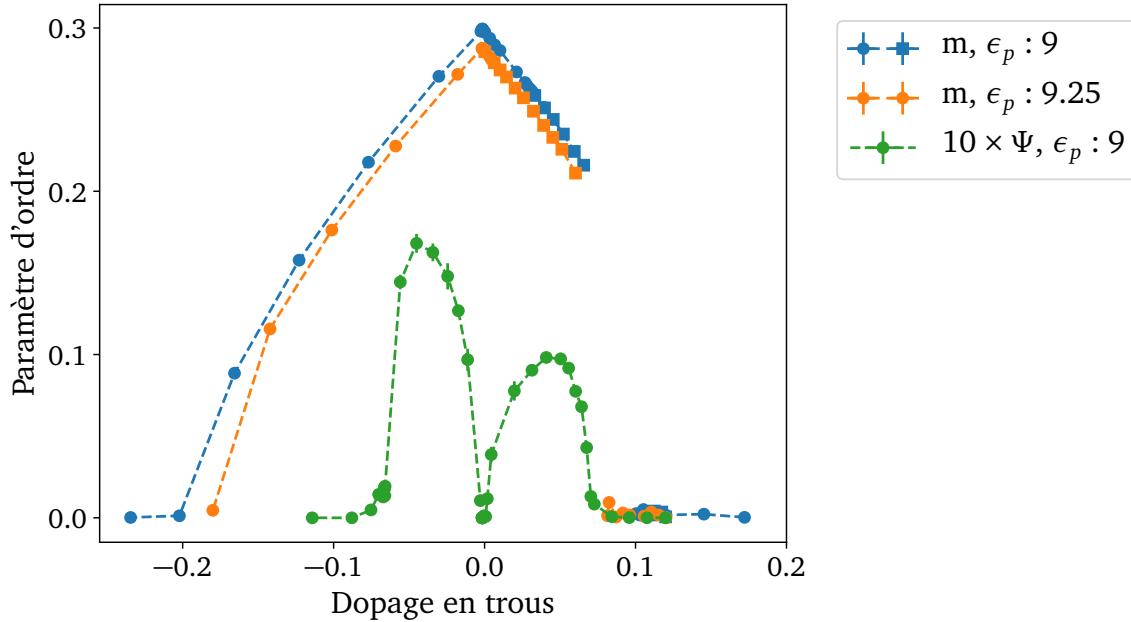


FIGURE 3.29 – Paramètres d'ordre supraconducteur et antiferromagnétique en fonction du dopage en trous. Je trace toujours avec des ronds les points obtenus à partir de solutions à droite de la figure et avec des carrés les solutions obtenues à partir de la gauche. Les courbes orange et bleue représentent le paramètre d'ordre antiferromagnétique. La courbe verte correspond au paramètre d'ordre supraconducteur mis à l'échelle pour pouvoir comparer les domaines d'apparition des deux phases.

Le paramètre d'ordre antiferromagnétique, visible en fonction du dopage sur la Figure 3.29, augmente (ou diminue dans l'autre sens) brutalement au passage de l'hystérèse. Ce paramètre d'ordre atteint d'ailleurs un maximum au demi-remplissage avant de redescendre du côté dopé en électrons comme attendu sur le diagramme de phase 1.1b. Cela indique alors que comme dans les cuprates, ici, la phase antiferromagnétique vient cacher la phase supraconductrice. On remarque que la phase antiferromagnétique est bien plus importante du côté dopé en électrons, ce qui était également attendu.

Je me rends alors compte que la phase supraconductrice des cuprates est en réalité mal décrite par le régime de paramètres utilisé ici, ou du moins la température choisie est en réalité trop haute. En effet, les cuprates ont une phase antiferromagnétique puis une phase supraconductrice, ce qui n'est bien sûr pas le cas ici. Ce résultat était encore attendu, de par la faible extension de la phase supraconductrice que j'avais remarquée au début. Cependant, il

36. Ce qui est en fait confirmé par le fait que m est nul pour de grandes occupations (voir la Figure 3.29)

est possible que la phase supraconductrice soit tout de même visible à plus basse température (comme le laisse présager le diagramme de phase et les résultats à température nulle [23] qui présentent des dômes beaucoup plus larges).

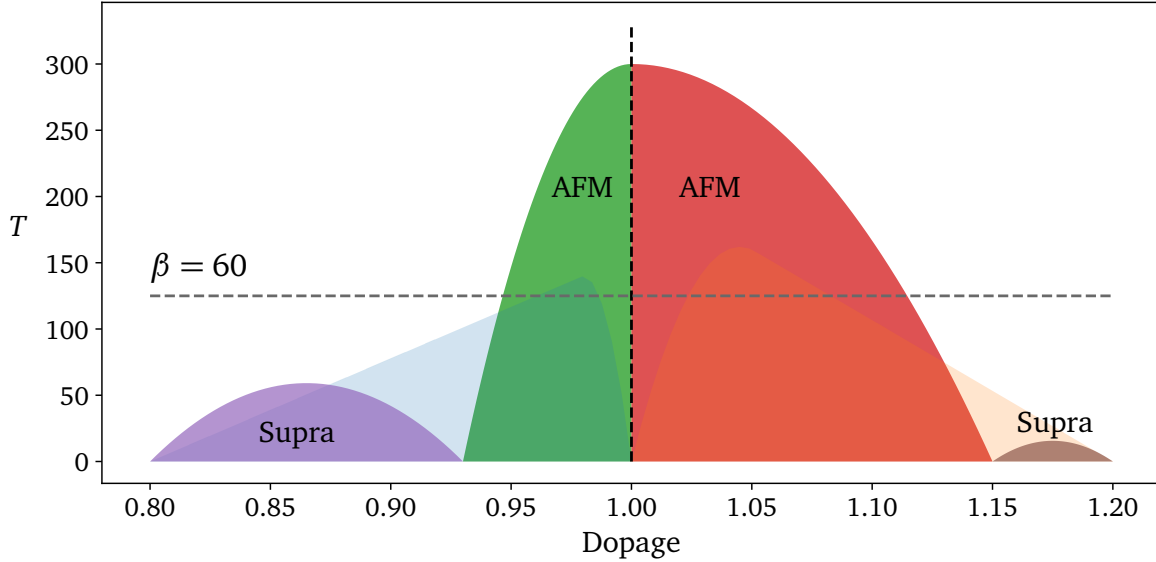


FIGURE 3.30 – Schématisation du diagramme de phase des cuprates. J’ai ici tracé en pâle une idée de ce à quoi ressemblent les phases supraconductrices en l’absence de phase antiferromagnétique. En plus opaque, je trace l’allure des deux phases quand on autorise l’antiferromagnétisme (*AFM* pour la phase antiferromagnétique et *Supra* pour la phase supraconductrice). On observe que les phases supraconductrices sont repoussées loin du demi-remplissage et plus faibles. Le diagramme en opaque ressemble volontairement au diagramme de phase réel sur la figure 1.1b.

Pour finir sur ce régime du dôme supraconducteur, je trace sur la Figure 3.30 une représentation schématique du diagramme de phase des cuprates. En l’absence de phase antiferromagnétique, on observe en très pâle ici deux dômes supraconducteurs de part et d’autre du demi-remplissage. Dans la solution du modèle à une bande ainsi qu’ici, le dôme côté dopé en électrons présente une température critique plus haute. Ce fait était un peu frappant, car assez distant de la réalité des matériaux. De plus, sur cette schématisation, j’ai reproduit l’asymétrie au sein des dômes supraconducteurs entre les côtés surdopé et sous-dopé. C’est cette asymétrie qui permet de comprendre pourquoi les résultats à température finie présentent des domaines de dopage moins grands que les résultats à température nulle [23].

Ensuite et si on autorise l’antiferromagnétisme au niveau du demi remplissage, on observe que la phase antiferromagnétique est plus étendue du côté dopé en électrons que du côté dopé en trous. Je n’explique pas pourquoi cela se produit ici, mais cela a pour effet de diminuer la taille des dômes supraconducteurs de façon asymétrique, ce qui donne en réalité une phase supraconductrice plus petite du côté dopé en électrons, contrairement à ce qui était observé sans considérer l’antiferromagnétisme. Cette phase antiferromagnétique vient donc corriger les résultats que j’avais jusqu’à présent et rapproche le modèle encore plus de la réalité des cuprates. On remarque que cette schématisation est très proche du diagramme de phase réel

(voir 1.1b).

Enfin, remarquez la position de la température utilisée ici, aux alentours de $\beta = 60$. Sans la phase antiferromagnétique, à cette température le système tombe dans le dôme supraconducteur pour un certain domaine de dopage alors qu'en présence de la phase antiferromagnétique, aucune solution supraconductrice n'est présente. Je n'ai malheureusement pas eu l'occasion d'atteindre de plus basses températures pour observer une coexistence des deux phases ou au moins l'apparition de la phase supraconductrice aux côtés de la phase antiferromagnétique.

3.6.2 Régime d'hystérèse

On observe que ce régime ($\epsilon_p = 9.25$) a exactement le même comportement dans la phase antiferromagnétique que précédemment. Cependant, la phase antiferromagnétique est plus étroite et présente un plus petit paramètre d'ordre que pour ϵ_p . De plus, l'hystérèse est beaucoup plus grande et beaucoup plus asymétrique comme on peut le voir sur la figure 3.28. Encore une fois, je ne me concentre pas sur cette phase dans ce mémoire donc je ne suis pas en mesure de donner des explications à ces observations, mais je remarque tout de même que la fermeture du gap de transfert de charge amène une plus grande transition de premier ordre avant le demi-remplissage (chose que j'observais déjà dans la phase normale et supraconductrice) et à un plus petit paramètre d'ordre antiferromagnétique.

Ensuite, en augmentant ϵ_p encore plus, pour des valeurs où il n'y a plus de régime d'isolant dans le modèle sans antiferromagnétisme, on observe tout de même un régime d'isolant. Cela va dans le sens de ce que j'ai dit un peu plus haut à propos de la largeur de la phase isolante qui semble agrandie en tenant compte de cette nouvelle phase antiferromagnétique. En reprenant l'analyse faite à propos de l'influence du gap de transfert de charge sur la supraconductivité, on pourrait penser que pour des paramètres fixés, comme la phase antiferromagnétique augmente le gap de transfert de charge, elle a tendance à faire disparaître la supraconductivité. Cependant, on ne retrouve pas de supraconductivité même dans les domaines de petits gaps de transfert de charge. L'antiferromagnétisme est donc bien plus fort que la phase supraconductrice dans le régime de paramètre considéré ici dans l'approximation de champ moyen dynamique.

La phase antiferromagnétique semble cependant très influencée par la présence du gap de transfert de charge. À l'inverse de la phase supraconductrice, le paramètre d'ordre maximal semble augmenter avec le gap de transfert de charge. Cela va dans le même sens qu'une autre étude du modèle à température nulle que vous pouvez retrouver en référence [62]. Une coexistence des deux phases semble donc être possible pour des valeurs intermédiaires de ce gap. Cela renforce l'idée qu'elles sont très liées dans le modèle de Hubbard à trois bandes.

Conclusion

Ainsi se termine mon étude théorique des cuprates. J'ai pu lors de cette maîtrise, atteindre mon objectif principal, qui était de vérifier que le modèle de Hubbard à trois bandes était en mesure de reproduire les résultats expérimentaux reliant la répartition des électrons au sein du plan d'oxyde de cuivre des cuprates à leur température critique maximale. La corrélation que je retrouve entre ces deux quantités ne semble cependant pas totale et n'est possible que localement dans l'espace des paramètres. Heureusement, les paramètres correspondant aux matériaux réels ne varient pas beaucoup [18] et cela me conforte dans l'idée que la corrélation expérimentale est bien reproduite par le modèle de Hubbard à trois bandes. La correction des résultats de température critique avec la rigidité superfluide m'a permis de rapprocher les résultats de la réalité du phénomène supraconducteur. J'ai pu remarquer que cette correction ne changeait pas les corrélations observées.

Ensuite, j'ai pu remarquer que la supraconductivité apparaît avec le gap de transfert de charge, mais également qu'elle disparaît quand ce gap devient trop grand. De plus, cette phase semble, proche du point de départ (1.4) de mon étude, être cantonnée dans une petite portion de l'espace des dopages sur les sites de cuivre et d'oxygène. Cela indique donc que le phénomène supraconducteur n'apparaît ici que dans un régime intermédiaire et disparaît assez rapidement. La région de l'espace des paramètres étudiée ici semble donc moins propice à la supraconductivité que celle dans laquelle se trouvent les cuprates.

Puis, j'ai commencé une exploration de l'espace des paramètres à la recherche des autres phases présentes dans les cuprates. Sur un amas à 4 sites, j'ai pu trouver une phase antiferromagnétique ainsi qu'une phase de pseudogap. Ces deux phases étaient déjà rencontrées dans le modèle à une bande et semblent être présentes dans une portion au moins de la région explorée. Elles viennent encore confirmer que le choix des paramètres que j'ai fait, même s'ils sont loin des paramètres réels, est tout de même opportun pour reproduire le comportement des cuprates. Pour mieux comprendre le modèle - et potentiellement les matériaux réels - il faudrait étudier plus en détail ces deux phases, et notamment à plus basse température. Cela demanderait donc des simulations plus précises dans la région de transition de premier ordre associée avec une étude plus systématique du prolongement analytique des différentes fonctions de Green. De plus, cette région correspond à la fermeture du gap de transfert de charge et à la disparition de la supraconductivité. Une étude plus approfondie à cet endroit pourrait alors permettre de mieux comprendre l'effet du gap de transfert de charge sur la supraconductivité. On retrouve également ce régime du côté dopé en électrons, chose que je n'ai pas beaucoup étudiée ou mentionnée dans ce mémoire. Il pourrait être intéressant de faire une étude comparative des deux régimes pour comprendre la différence de mécanisme entre les deux dômes.

Encore, le modèle à une bande étant très étudié, il serait intéressant d'étudier plus en détail les similarités avec le modèle à trois bandes. Cela permettrait notamment de vérifier que les comportements observés à une bande le sont aussi ici, pour s'assurer que le modèle à

trois bandes est bien une extension du modèle à une bande. Cela permettrait également de régler une question qui a été centrale depuis l'introduction du modèle à une bande, à savoir s'il suffit pour comprendre la supraconductivité dans les cuprates. Dans cette optique, une étude plus approfondie de l'effet des susceptibilités - notamment sur les sites d'oxygène - sur la supraconductivité pourrait permettre une meilleure compréhension du mécanisme menant à ce phénomène.

Enfin, je n'ai considéré ici qu'un amas de 4 mailles élémentaires, ce qui suffit déjà à décrire la supraconductivité dans les cuprates mais qui ne rend pas compte des potentiels effets à longue distance des interactions locales. Si CT-Seg-3B et les ressources de calcul le permettent, l'étude d'un amas plus grand pourrait permettre de mieux comprendre l'apparition du phénomène supraconducteur. L'exploration du modèle à trois bandes en est seulement à ses débuts.

Chapitre 4

Annexes

4.1 Modification du programme CT-Seg-3B

4.1.1 L'erreur

Au début de ma maîtrise, le programme CT-Seg-3B fonctionnait grâce à la bibliothèque ALPS¹. Cette bibliothèque permettait de mettre en place la boucle principale du programme, à savoir la boucle qui s'occupe d'appeler les fonctions de mises à jour, de mesure et autres composantes principales du Monte-Carlo. Elle permettait également d'enregistrer les différentes mesures et d'estimer l'erreur de la simulation. Comme nous n'arrivions pas à installer cette bibliothèque sur les superordinateurs, et dans le but de simplifier le programme légèrement en se séparant d'une bibliothèque assez imposante, nous avons décidé de la remplacer. Pour remplacer ALPS, deux choses étaient importantes à récupérer : la moyenne pour pouvoir continuer le cycle de DMFT et l'erreur sur la simulation Monte-Carlo.

$$\mathbb{E}(X) \text{ l'espérance} \quad (4.1)$$

$$\sigma(X) = \frac{\text{Var}(X)}{\sqrt{N}} \text{ l'erreur} \quad (4.2)$$

Avant cela, quelques petites précisions sur les termes employés sont nécessaires. Une simulation Monte-Carlo cherche à trouver la moyenne d'une variable aléatoire. Comme il n'est pas possible de calculer la loi directement, j'utilise l'algorithme pour simuler cette loi de probabilité et ainsi effectuer plusieurs réalisations de cette loi et en tirer des estimateurs des données qui m'intéressent. Les estimateurs non biaisés dont j'ai besoin sont donc :

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \quad (4.3)$$

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2}. \quad (4.4)$$

Dans ces expressions, j'ai considéré que les variables X_i suivent toutes la même loi de probabilité.

1. <http://alps.comp-phys.org>

La moyenne Cette partie est la plus simple, car il suffit de récupérer à chaque mesure le résultat et de l'additionner à l'accumulation des mesures. À la fin de la simulation, il faut simplement diviser le nombre obtenu par le nombre de mesures et on obtient la moyenne de l'observable. Cette opération ne prend pas de place en mémoire, car il suffit d'un nombre flottant par observable pour l'accumulation par observable ainsi qu'un nombre entier pour toutes les observables.

Estimateur L'erreur est un tout petit peu compliquée à obtenir, car il faut également conserver la somme des carrés des mesures. Cela ne prend pas beaucoup plus de place donc elle se calcule sans problème. On se souvient cependant que toutes les mesures sont potentiellement corrélées du fait de la nature de l'algorithme de Metropolis-Hastings. Or la formule de l'estimateur de l'erreur que j'ai donnée au-dessus n'est valable que si les variables aléatoires sont indépendantes. Ici, elles ne sont pas indépendantes et cet estimateur n'est donc pas correct, il a tendance à sous-estimer l'erreur. On remarque cependant que l'estimateur de la moyenne n'est pas touché par cette dépendance entre les variables.

Il est cependant possible de trouver la vraie erreur sur les mesures en faisant une étape de décorrélation des mesures faites tout au long de la simulation. En réalité, la méthode que je vais présenter ci-dessous a fait l'objet d'articles et était utilisée par l'algorithme d'ALPS [63]. J'y apporte une démonstration mathématique permettant de se représenter correctement le processus d'obtention de l'erreur.

Je m'intéresse tout d'abord à l'espérance du carré de l'estimateur $\bar{\sigma}$. En effet, l'introduction de la racine carrée ne permet pas de faire de calcul intéressant.

$$\mathbb{E}[\bar{\sigma}^2] = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \mathbb{E}[(X_i - \bar{X})^2]. \quad (4.5)$$

Un terme dans la somme peut se réécrire :

$$\mathbb{E}[(X_i - \bar{X})^2] = \mathbb{E}\left[\left(\frac{N-1}{N}X_i - \frac{1}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N X_j\right)^2\right] = \text{Var}\left[\frac{N-1}{N}X_i - \frac{1}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N X_j\right]. \quad (4.6)$$

Dans le cas où les variables sont indépendantes, cela donne² :

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(X_i - \bar{X})^2] &= \frac{(N-1)^2}{N^2} \text{Var}[X_1] + \frac{N-1}{N^2} \text{Var}[X_1] \\ &= \frac{N-1}{N} \text{Var}[X_1] \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\mathbb{E}[\bar{\sigma}^2] = \frac{\text{Var}[X_1]}{N} \quad (4.8)$$

ce qui exactement ce que l'on veut. L'opérateur est donc bien non biaisé. Cependant, si les variables ne sont pas indépendantes - ce qui est le cas de la simulation Monte-Carlo - des

2. J'utilise les formules $\text{Var}[X, Y] = \text{Var}[X] + \text{Var}[Y] - 2\text{Cov}[X, Y]$ et $\text{Var}[X_i] = \text{Var}[X_1]$

termes de covariance viennent se rajouter à cela :

$$\mathbb{E}[(X_i - \bar{X})^2] = \text{Var}[X_i - \bar{X}] \quad (4.9)$$

$$= \text{Var}[X_i] + \text{Var}[\bar{X}] - 2\text{Cov}[X_i, \bar{X}] \quad (4.10)$$

$$= \frac{N-2}{N} \text{Var}[X_i] + \text{Var}[\bar{X}] - \frac{2}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \text{Cov}[X_i, X_j] \quad (4.11)$$

$$\text{Var}[\bar{X}] = \frac{1}{N^2} \left(\sum_{i=1}^N \text{Var}[X_i] + \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \text{Cov}[X_i, X_j] \right) \quad (4.12)$$

$$\mathbb{E}[\bar{\sigma}^2] = \frac{1}{N(N-1)} \left(\sum_{i=1}^N \frac{N-1}{N} \text{Var}[X_i] - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \text{Cov}[X_i, X_j] \right) \quad (4.13)$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{Var}[X_i] - \frac{1}{N^2(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \text{Cov}[X_i, X_j]. \quad (4.14)$$

Or rappelez-vous que je cherche à estimer l'erreur de l'estimateur de la moyenne. $\bar{\sigma}^2$ doit en réalité être un estimateur de la variance de \bar{X} . Je vais donc remanier un peu l'expression ci-dessus pour mettre en valeur le biais de l'opérateur $\bar{\sigma}^2$:

$$\text{Var}(\bar{X}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \text{Var}[X_i] + \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \text{Cov}[X_i, X_j] \quad (4.15)$$

$$\mathbb{E}[\bar{\sigma}^2] = \text{Var}(\bar{X}) - R_0 \quad (4.16)$$

$$R_0 = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \text{Cov}[X_i, X_j]. \quad (4.17)$$

Avant de continuer, il faut se rappeler que cette expression est valable pour tous types de variables aléatoires X_i sans suppositions jusqu'à maintenant. Je l'utiliserai encore plus tard.

Procédure de binning L'estimateur que je récupère est donc biaisé à ce stade. Rappelez-vous, au vu de la nature de la simulation, que les corrélations qui produisent ce biais viennent du fait que les mesures sont faites trop proches les unes des autres. Donc, la covariance entre les mesures est le plus souvent positive - on a affaire à des corrélations, mais pas des anti-corrélations. Dans ce cas-là, on voit que mon estimateur a une espérance plus faible que la valeur que je veux récupérer - $\text{Var}(\bar{X})$ - à cause des corrélations.

Je veux alors pouvoir en quelque sorte *décorrél*er mes mesures a posteriori pour pouvoir accéder à la véritable erreur de ma mesure. Pour ce faire, je vais d'abord supposer, encore une fois du fait de la nature de la simulation, que $\text{Cov}[X_i, X_j]$ ne dépend que de la distance $|i-j|$ et est une fonction décroissante de cette distance. Cela n'est pas une trop grosse approximation, car on voit facilement que les corrélations dépendent du nombre de pas entre deux mesures

et que plus la simulation fait de pas entre deux mesures, plus elles sont décorrélées. Puis, je vais regrouper mes N mesures par paquet de deux, faire la moyenne de ces deux mesures dans chaque paquet - il y a $\frac{N}{2}$ petits paquets à ce stade - et remplacer mes mesures par ces moyennes. Comme N n'est pas nécessairement un nombre pair, si une mesure se trouve toute seule, je l'oublie à cette étape. Je vais ensuite calculer mes estimateurs à partir de ces moyennes. Je répéterai cette procédure jusqu'à ce que ne soit plus possible.³ Je donne une illustration d'un regroupement en paquets sur la figure 4.1. L'estimateur de la moyenne ne va pas changer - ou presque pas - mais l'estimateur de l'erreur si. Je regarde alors la valeur de l'estimateur de l'erreur à l'étape k de la procédure. À cette étape, on a un total de N_k paquets contenant chacun 2^k mesures initiales. Je suppose que N est une puissance de 2 pour simplifier les calculs. On a alors $N_k = \frac{N}{2^k}$. Je définis donc les nouvelles «mesures» à l'étape k par :

$$X_{k,i} = \frac{1}{2^k} \sum_{j=1}^{2^k} X_{2^k(i-1)+j} \quad (4.18)$$

i allant de 1 à N_k . Comme j'ai supposé que N était une puissance de 2, la moyenne de ces variables est la même quelque soit l'étape et vaut \bar{X} . Je peux ici réutiliser la formule (4.17), car elle est générale pour toutes variables aléatoires. Cette formule est bien définie sauf pour $N_k = 1$. Le dernier estimateur que l'on peut calculer est donc celui pour $2^k = \frac{N}{2}$. Pour chaque k on se retrouve alors avec :

$$\bar{\sigma}_k = \frac{1}{N_k(N_k - 1)} \sum_{i=1}^{N_k} (X_{k,i} - \bar{X})^2 \quad (4.19)$$

$$\mathbb{E}[\bar{\sigma}_k^2] = (\bar{X}) - R_k \quad (4.20)$$

$$R_k = \frac{1}{N_k(N_k - 1)} \sum_{i=1}^{N_k} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_k} \text{Cov}[X_{k,i}, X_{k,j}] \quad (4.21)$$

$$\text{Cov}[X_{k,i}, X_{k,j}] = \frac{1}{2^{2k}} \sum_{l=1}^{2^k} \sum_{m=1}^{2^k} \text{Cov}[X_{2^k(i-1)+l}, X_{2^k(j-1)+m}] \text{ si } i \neq j \quad (4.22)$$

$$R_k = \frac{1}{N_k(N_k - 1)2^{2k}} \sum_{i=1}^{N_k} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_k} \sum_{l=1}^{2^k} \sum_{m=1}^{2^k} \text{Cov}[X_{2^k(i-1)+l}, X_{2^k(j-1)+m}]. \quad (4.23)$$

Utilité de la procédure On obtient donc une expression légèrement plus compliquée que précédemment. Cependant, le comportement de l'estimateur en fonction du nombre de mesures par petits paquets est toujours le même et est visible sur la Figure 4.3. On y observe que l'estimateur croît tout d'abord avec k avant de saturer à un plateau. Puis il redescend pour les derniers points calculés. Je vais tout d'abord démontrer que l'espérance de l'estimateur $\bar{\sigma}_k$ est croissante avec k , ce qui expliquera le premier comportement croissant de l'estimateur. Je reviendrai ensuite sur les plus grandes valeurs de k pour comprendre cette chute pour les derniers points.

3. À force de diviser le nombre de mesures par deux, on va bien se retrouver avec 1 mesure et ne plus pouvoir la regrouper en paquet plus grand.

Je vous propose donc de regarder plus en détail l'expression de R_k . Il est possible de voir ce reste comme une moyenne - il y a exactement $N_k(N_k - 1)2^{2k}$ termes dans la somme - de covariances. On remarque qu'il s'agit exactement de toutes les covariances possibles entre termes au sein de paquets différents. Je vais alors démontrer que ce terme, positif, est décroissant. Intuitivement, les termes de covariances entre mesures de différents paquets vont être de plus en plus petits à mesure que la taille des paquets augmente. Les seuls termes significatifs restants seront ceux aux limites de ces paquets et seront minoritaires par rapport aux autres termes à longue distance, ce qui donnera des petites moyennes.

Je commence alors par regarder la différence en R_k et R_{k+1} . Pour commencer, je remarque que si un terme⁴ est présent dans R_{k+1} c'est qu'il était déjà présent dans R_k . En effet, pour un terme $\text{Cov}[X_l, X_m]$ de R_{k+1} , X_l et X_m sont dans des paquets différents à l'étape $k + 1$. Comme les paquets de l'étape $k + 1$ sont simplement des fusions de petits paquets de k , X_l et X_m sont également dans des paquets différents à l'étape k . j'illustre cela dans la figure 4.1.

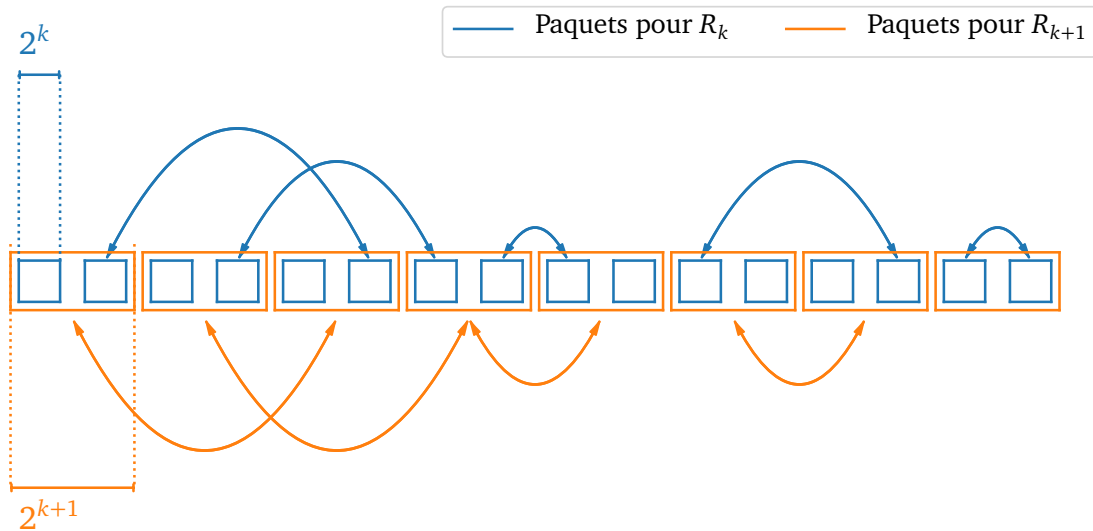


FIGURE 4.1 – Illustration de la différence entre R_k et R_{k+1} . Les paquets de R_{k+1} sont obtenus en fusionnant deux paquets voisins dans R_k . Les flèches représentent des termes de R_k (bleu) et R_{k+1} (orange). Il faut bien se rappeler que par définition, une flèche ne peut pas être entre deux X_i au sein d'un même paquet. Chaque terme de R_{k+1} est présent dans R_k , comme on peut le voir avec les 4 premières flèches orange qui trouvent une contrepartie bleue. La flèche bleue tout à droite elle, ne se retrouve pas en orange, une flèche ne pouvant pas être au sein d'un même paquet.

Ensuite, je vais regarder quels termes je retire de la moyenne en passant de R_k à R_{k+1} . Ces termes sont exactement les termes de covariance entre deux anciens paquets voisins qui ont fusionné dans la procédure. Comme j'ai supposé que la covariance ne dépend que de la distance entre les indices des variables, je vais regrouper les termes par cette distance et donc

4. Je nomme *terme* une expression du type $\text{Cov}[X_l, X_m]$ avec l différent de m . J'appelle *distance* de ce terme $|l - m|$.

leurs valeurs.

Je vais d'abord démontrer que si je nomme β_i le nombre de termes conservés entre R_k à R_{k+1} pour une certaine distance i , alors β_i croît avec i . En d'autres mots et en se souvenant que la valeur d'un terme décroît avec sa distance, on enlève beaucoup de termes grands (petite distance) et peu de termes petits (grande distance) ce qui a comme effet de faire baisser la moyenne. Puis je vais démontrer que cela entraîne une augmentation de l'expression (4.23).

Je commence alors par regarder le nombre de termes correspondant à une certaine distance $i \in \{1, 2, \dots, N-1\}$. Remarquez que dans le terme $k+1$, les termes ayant un i supérieur ou égal à 2^{k+1} sont tous présents ($\beta_i = 1$). Les autres termes sont à classer en deux catégories :

- les termes de R_k dont la distance est inférieure strictement à 2^k . Un tel terme s'écrit $\text{Cov}[X_j, X_{j+1}]$ ou $\text{Cov}[X_j, X_{j-1}]$ mais tous ces termes ne sont pas nécessairement dans R_k . Pour apparaître dans R_k , un tel terme doit traverser exactement une frontière de groupe. Puis pour chaque frontière de groupe, il y a exactement $2 \times i$ termes avec cette même distance. Soit un total de $2i(N_k - 1)$ termes de distance i . Dans R_{k+1} , ces termes ont une distance également inférieure à 2^{k+1} et en reprenant le même raisonnement, il n'y en a donc plus que $2i(N_{k+1} - 1) = 2i(N_k/2 - 1)$. On en a donc enlevé une proportion $\beta_i = \frac{N_k/2-1}{N_k-1}$ qui ne dépend pas de i .
- les termes dont la distance i est comprise dans $\{2^k, \dots, 2^{k+1} - 1\}$, on remarque qu'ils existent tous dans R_k . En effet, il n'est pas possible d'avoir X_l et X_m dans un même paquet si $|l - m| \geq 2^k$, par définition des paquets. Il y en a alors un total de $2(N - i)$ dans R_k . Puis dans le terme R_{k+1} , il y en a $2i(N_{k+1} - 1)$ car $i < 2^{k+1}$ ⁵. On a donc conservé une proportion :

$$\beta_i = \frac{2i(N_{k+1} - 1)}{2(N - i)} = \frac{N_k/2 - 1}{N/i - 1}. \quad (4.24)$$

On remarque que ce terme est croissant avec i et toujours entre $\frac{N_k/2-1}{N_k-1}$ et 1.

J'ai donc montré que les β_i sont croissants avec la distance i .

Tournez-vous maintenant vers la figure 4.2 qui est une schématisation de la situation. J'y représente à gauche l'allure de β_i en fonction de la distance i pour un certain k fixé. On y vérifie - si c'était encore nécessaire - que β_i croît avec i . Je présente ensuite à droite la distribution des termes dans R_k et R_{k+1} . On voit que du fait de la décroissance de β_i , on enlève plus de termes de basse distance (donc de haute valeur) que de termes de haute distance (donc de basse valeur) en proportion, ce qui a comme effet de baisser la moyenne des termes - soit exactement R_{k+1} . Après cette réflexion graphique, il reste à rédiger ce même raisonnement.

Pour ce faire, j'ai besoin d'exprimer R_{k+1} en fonction de ces β_i . Je prends alors les termes de R_k et je les trie par distance croissante. J'obtiens - avec m le nombre de termes de R_k :

$$R_k = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m Y_j \quad (4.25)$$

où Y_j est le j^{e} plus grand terme ($Y_1 \geq Y_2 \geq \dots \geq Y_m$) de R_k ⁶. En les regroupant par valeur

5. Selon le point juste au-dessus

6. Les Y_i sont donc des termes du type $\text{Cov}[X_l, X_m]$

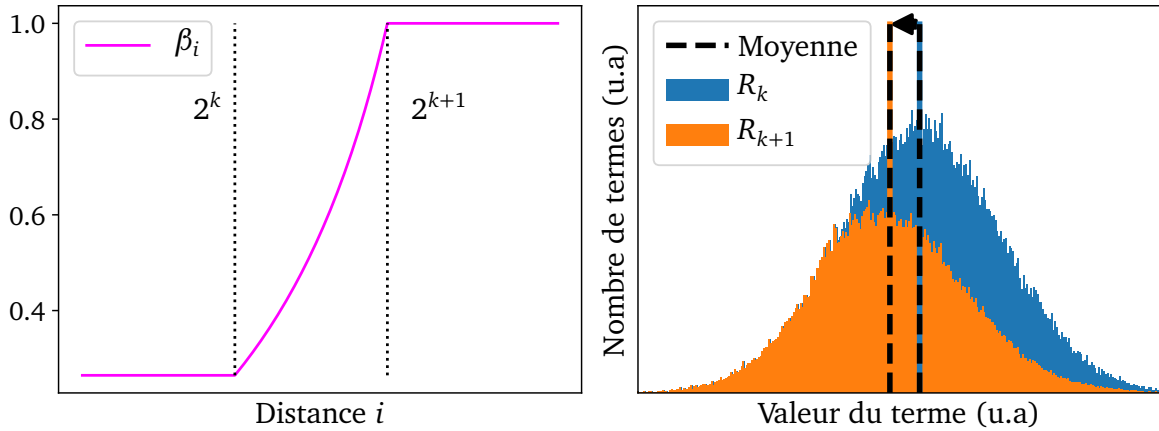


FIGURE 4.2 – À gauche : Proportion des termes de R_k présents dans R_{k+1} en fonction de la distance i . On observe bien la croissance de β_i . À droite : Répartition des termes dans R_k et R_{k+1} en fonction de leur valeur. On observe bien que si on applique β_i à R_k , la moyenne se déplace vers la gauche donc diminue.

de leur distance, on obtient :

$$R_k = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} N_i Z_i}{\sum_{i=1}^{N-1} N_i} \quad (4.26)$$

où N_i est le nombre de termes de distance i et Z_i la valeur d'un terme de distance i . Je peux maintenant écrire R_{k+1} en fonction des β_i :

$$R_{k+1} = \frac{\sum_{i=1}^{N-1} (\beta_i N_i) Z_i}{\sum_{i=1}^{N-1} (\beta_i N_i)} \quad (4.27)$$

$$= \frac{\sum_{i=1}^{N-1} \beta_i (N_i Z_i)}{\sum_{i=1}^{N-1} \beta_i (N_i \times 1)}. \quad (4.28)$$

Cependant, je n'ai aucune information sur les N_i . Je reviens donc dans l'autre sens - en développant les N_i pour retourner aux termes individuels - pour m'en débarrasser :

$$R_{k+1} = \frac{\sum_{j=1}^m \alpha_j Y_j}{\sum_{j=1}^m \alpha_j} \quad (4.29)$$

où $\alpha_j = \beta_i$ si la distance du terme Y_j vaut i . Or on a vu que $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_{N-1}$. Donc $\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_m$, les Y_j étant triés par ordre croissant de distance.

Je démontre finalement que $R_k \geq R_{k+1}$:

$$m \left(\sum_{j=1}^m \alpha_j \right) (R_k - R_{k+1}) = \left(\sum_{j=1}^m \alpha_j \right) \left(\sum_{i=1}^m Y_i \right) - \sum_{i=1}^m m \alpha_i Y_i \quad (4.30)$$

$$= \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^m \alpha_j - m \alpha_i \right) Y_i \quad (4.31)$$

$$= \sum_{i=1}^m \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^m (\alpha_j - \alpha_i) Y_i \quad (4.32)$$

$$= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{i-1} (\alpha_j - \alpha_i) Y_i + \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\alpha_j - \alpha_i) Y_i \quad (4.33)$$

$$= \sum_{j=1}^m \sum_{i=j+1}^m (\alpha_j - \alpha_i) Y_i + \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\alpha_j - \alpha_i) Y_i \quad (4.34)$$

$$= \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\alpha_i - \alpha_j) Y_j + \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\alpha_j - \alpha_i) Y_i \quad (4.35)$$

$$= \sum_{i=1}^m \sum_{j=i+1}^m (\alpha_j - \alpha_i) (Y_i - Y_j) \geq 0. \quad (4.36)$$

Je viens donc de prouver que cette procédure de binning permet de réduire le biais de l'estimateur. On ne peut cependant pas prouver que le biais de l'estimateur tend vers 0 puisque le dernier R_k bien défini ne vaut pas 0. Cette procédure permet cependant d'avoir une erreur plus proche de l'erreur réelle de la simulation.

Retour aux courbes Après ces calculs très théoriques, il faut se rappeler que je ne regardais que l'espérance de l'estimateur de l'erreur. En réalité, il n'est pas possible d'y accéder directement à moins de refaire une simulation beaucoup de fois et d'amasser des statistiques pour trouver la valeur exacte. Cela n'est bien sûr pas possible ici, une simulation durant déjà bien 30 minutes et un point dans le diagramme de phase nécessitant typiquement 100 telles simulations. Je n'ai donc en réalité accès qu'à **une** mesure de l'estimateur pour chaque valeur de k .

Pour déterminer une valeur approchée de l'erreur réelle, il faut en réalité regarder la courbe de l'estimateur $\bar{\sigma}_k$ en fonction de l'étape de binning k . Je vous propose donc sur la figure 4.3 l'allure de quelques courbes de ce type. La première observation que je veux faire sur ces courbes est l'échelle de l'axe des ordonnées qui est différente sur les 4 panneaux. On observe bien que l'erreur diminue avec le nombre total de mesures. La décroissance est d'ailleurs approximativement en \sqrt{N} , comme le présageait la formule (4.8). Ensuite, si on passe cette fois aux figures individuelles, on remarque une décroissance de la valeur estimée de l'erreur sur les dernières étapes de binning. Cette décroissance est due en réalité à l'écart entre l'espérance théorique et la valeur de l'estimateur. En effet, sur ces derniers points, il ne reste plus qu'un petit nombre de gros paquets. Un estimateur statistique sur seulement quelques points ne donne en général pas une valeur intéressante. Dans la librairie ALPS, ils considèrent qu'un minimum de 100 paquets est nécessaire pour que l'estimateur suive sa loi

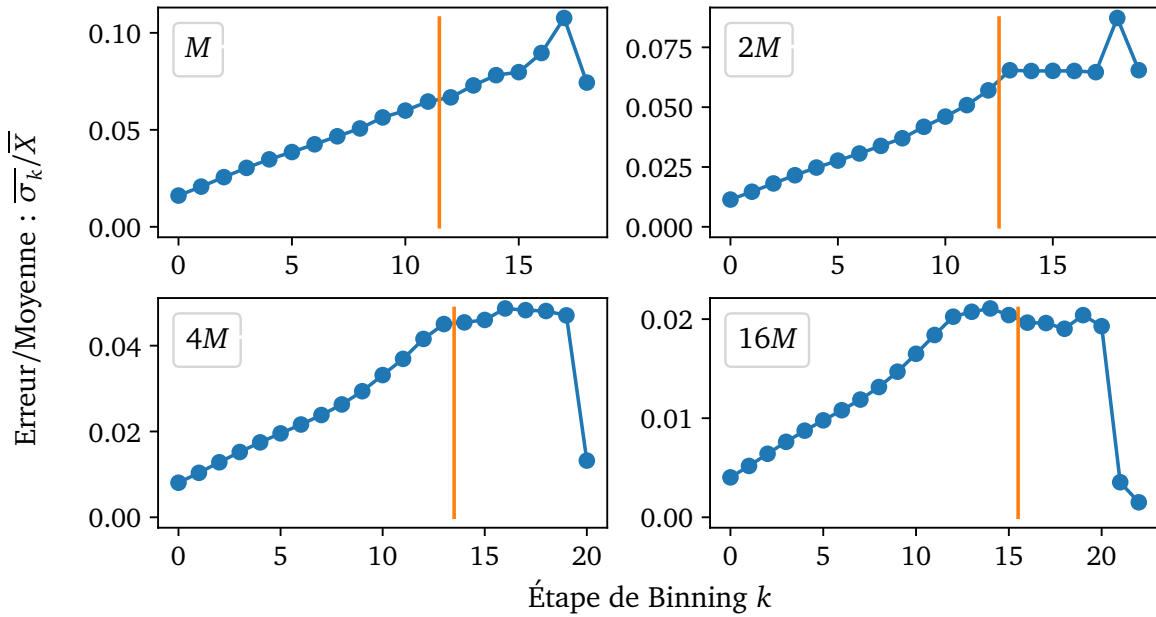


FIGURE 4.3 – Erreur relative en fonction de l'étape de binning. Le nombre de mesures N de chaque simulation est indiqué en légende. Le nombre de mesures par paquet vaut 2^k où k est l'étape de binning. Le nombre de paquets vaut $n_{paq} = \frac{N}{2^k}$ et décroît donc avec l'étape de binning. J'indique par un trait orange la limite (arbitraire et fixée à $n_{paq} = 2^7$) à partir de laquelle le nombre de paquets est trop petit pour avoir un estimateur proche de sa valeur moyenne.

moyenne. Comme $128 = 2^7$, il faut donc enlever environ les 7 derniers points sur chaque figure pour n'observer que le comportement moyen de l'estimateur. Je place donc la barre orange comme délimitation du régime où l'erreur est bien approchée par l'estimateur du point de vue statistique.

Sans considérer cette contrainte, tout d'abord, on observe deux comportements distincts sur cette figure. Tout d'abord, le premier panneau pour lequel l'erreur semble toujours augmenter. Puis les trois autres dans lesquels on observe la formation d'un plateau pour un grand nombre d'étapes de binning. Ce plateau provient du fait qu'il n'y a plus (ou très peu) de corrélations à longue distance entre les paquets et que donc la valeur de R_k tombe proche de 0 et ne varie plus. La valeur de l'erreur est donc bien approchée quand ce régime survient. Le plateau pour la courbe correspondant à un nombre $2M$ de mesures semble cependant un peu suspect au vu du changement de pente anormalement brusque.

Ensuite, en considérant la ligne orange, on remarque en réalité que seule la dernière courbe présente ce régime de saturation en plateau. Du point de vue de l'estimateur de l'erreur, c'est donc la courbe qui donnera la valeur la plus fiable. Cependant, cette courbe correspond à un temps de mesure de 120 minutes. On observe ensuite que ce plateau démarre à peu près deux ou trois points avant la ligne orange. Reculer de deux points correspondant à une division par 4 du nombre de mesures, une simulation avec 4 fois moins de mesures serait donc suffisante pour la convergence de l'erreur. Je choisis donc une durée de 30 minutes pour les simulations. Comme on n'observe pas exactement un plateau à ce nombre de mesures et que l'erreur

retombe pour les dernières valeurs, je prends comme estimateur final de l'erreur la valeur maximale rencontrée sur la courbe. Cela me donne en réalité une bonne idée de l'erreur, malgré les fluctuations de la queue des données. Ici, l'erreur est approximativement de 5% ce qui est correct pour le cycle d'autocohérence.

4.1.2 Introduction de t'_{pp}

L'article [19] qui a servi de point de départ pour ce travail de maîtrise et qui avait utilisé le programme CT-Seg-3B, avait fixé la valeur du saut deuxième voisin des sites oxygènes à la même valeur que le saut premier voisin entre ces mêmes sites ($t_{pp} = t'_{pp}$). Dans le but de pouvoir atteindre des régimes de paramètres correspondant à des matériaux réels et de voir l'effet de plus de paramètres du modèle, j'ai ajouté la possibilité de varier ces deux paramètres indépendamment. Dans les faits, il fallait donc le rajouter dans le code tout simplement en changeant l'expression du Hamiltonien sans interactions. Seulement les paramètres apparaissent également dans le calcul de certaines observables. En effet, les observables qui ne sont pas directement calculées dans le solveur d'impureté - comme l'occupation sur les oxygènes dont j'ai besoin par exemple - sont calculées par des sommes sur les fréquences de Matsubara. En règle générale, de telles sommes intègrent un facteur $e^{i\omega_n 0^+}$ ⁷. Un tel facteur empêche un calcul direct de la somme et nécessite un protocole compliqué. Il est cependant possible de se débarrasser de ce terme de convergence en ne calculant pas la somme directement, mais sa différence au terme sans interaction. Ce terme sans interactions est également compliqué, mais calculable exactement et on se limite en général aux termes pour $i\omega_n$ grand, ce qui suffit pour assurer la convergence. On appelle ces termes la queue de la fonction de Green. Je dois donc trouver l'expression de ces queues quand t'_{pp} est différent de t_{pp} .

Je rappelle que l'on cherche à calculer l'occupation sur les sites d'oxygène. Comme le modèle sans interaction présente une symétrie de spin, je laisse tomber les indices de spin. Je ne considère qu'un spin, le résultat complet doit alors être multiplié par 2 pour trouver le nombre d'électrons par maille élémentaire. Puis, les orbitales 2 et 3 sont les orbitales d'oxygène. On a donc :

$$n_p = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbf{k}} \left(G_{2,2}^0(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_{3,3}^0(\mathbf{k}, i\omega_n) \right). \quad (4.37)$$

Ensuite, il faut trouver les expressions des fonctions de Green sans interaction sur les sites d'oxygène. On se souvient de la formule :

$$G^0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - h_0(\mathbf{k})} \quad (4.38)$$

$$= \begin{pmatrix} i\omega_n + \mu & -t_{pd}(1 - e^{ik_x}) & -t_{pd}(1 - e^{ik_y}) \\ -t_{pd}(1 - e^{-ik_x}) & i\omega_n + \mu - \epsilon_p + 2t_{pp} - 2t'_{pp} \cos k_x & -t_{pp}(1 - e^{-ik_x})(1 - e^{ik_y}) \\ -t_{pd}(1 - e^{-ik_y}) & -t_{pp}(1 - e^{ik_x})(1 - e^{-ik_y}) & i\omega_n + \mu - \epsilon_p + 2t_{pp} - 2t'_{pp} \cos k_y \end{pmatrix}^{-1} \quad (4.39)$$

$$\equiv \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1}. \quad (4.40)$$

A est la partie sur les cuivres ($i\omega_n + \mu$) et D est une matrice 2×2 . On veut donc calculer cet inverse de matrice pour obtenir les composantes diagonales des deux dernières colonnes

7. Parce que la série des $G(i\omega_n)$ ne converge pas seule

et lignes. Pour faire cela, et, car $i\omega_n + \mu$ n'est jamais nul, j'utilise la formule d'inversion d'une matrice 2×2 . par bloc qui dit que la partie sur les sites de cuivre est donnée par le complément de Schur :

$$Z = D - CA^{-1}B \quad (4.41)$$

$$= \begin{pmatrix} i\omega_n + \mu - (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_x) - \frac{|V_x|^2}{i\omega_n + \mu} & -W_{xy} - \frac{V_y V_x^\dagger}{i\omega_n + \mu} \\ -W_{xy}^\dagger + \frac{V_y^\dagger V_x}{i\omega_n + \mu} & i\omega_n + \mu - (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_y) - \frac{|V_y|^2}{i\omega_n + \mu} \end{pmatrix}. \quad (4.42)$$

Dans ces expressions, j'ai défini : $W_x = 2t'_{pp} \cos k_x$, $W_y = 2t'_{pp} \cos k_y$, $W_{xy} = t_{pp}(1 - e^{-jk_x})(1 - e^{jk_y})$, $V_x = t_{pd}(1 - e^{ik_x})$, $V_y = t_{pd}(1 - e^{ik_y})$. Je dois encore inverser cette matrice ce que je fais en calculant d'abord son déterminant :

$$\det(Z) = \left(i\omega_n + \mu - (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_x) - \frac{|V_x|^2}{i\omega_n + \mu} \right) \left(i\omega_n + \mu - (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_y) - \frac{|V_y|^2}{i\omega_n + \mu} \right) \quad (4.43)$$

$$- \left(W_{xy} + \frac{V_y V_x^\dagger}{i\omega_n + \mu} \right) \left(W_{xy}^\dagger - \frac{V_y^\dagger V_x}{i\omega_n + \mu} \right) \quad (4.44)$$

$$= (i\omega_n + \mu)^2 - (i\omega_n + \mu)(2\epsilon_p - 4t_{pp} + W_y + W_x) \quad (4.45)$$

$$- (|V_y|^2 + |V_x|^2 + |W_{xy}|^2) \quad (4.46)$$

$$+ (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_x)(\epsilon_p - 2t_{pp} + W_y) + o(1) \quad (4.47)$$

$$= (i\omega_n)^2 - i\omega_n(2\epsilon_p - 2\mu - 4t_{pp} + W_y + W_x) \quad (4.48)$$

$$- (|V_y|^2 + |V_x|^2 + |W_{xy}|^2) \quad (4.49)$$

$$+ (\epsilon_p - \mu - 2t_{pp} + W_x)(\epsilon_p - \mu - 2t_{pp} + W_y) + o(1) \quad (4.50)$$

et,

$$\sum_{\sigma=2}^3 G_{\sigma\sigma}^0(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{i\omega_n + \mu - (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_y) - \frac{|V_y|^2}{i\omega_n + \mu} + i\omega_n + \mu - (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_x) - \frac{|V_x|^2}{i\omega_n + \mu}}{\det(Z)} \quad (4.51)$$

$$= \frac{2i\omega_n - (2(\epsilon_p - \mu - 2t_{pp}) + W_y + W_x) - \frac{|V_y|^2 + |V_x|^2}{i\omega_n + \mu}}{\det(Z)}. \quad (4.52)$$

Cela commence à être plutôt compliqué et lourd en notation, surtout s'il fallait intégrer ce terme selon \mathbf{k} . Je vais donc calculer seulement une approximation de la formule pour les grandes fréquences de Matsubara, c'est-à-dire quand n est grand⁸. Je cherche alors à avoir une expansion à l'ordre 3 en $i\omega_n$ de $G(\mathbf{k}, i\omega_n)$. Pour cela, je regarde tout d'abord comment

8. En valeur absolue

s'écrit l'expansion de $\frac{x^u}{x^2+ax+b+o(1)}$ pour $u \in \{-1, 0, 1\}$, au troisième ordre :

$$\frac{x^u}{x^2+ax+b+o(1)} = \frac{1}{x^{2-u}} \left(\frac{1}{1 + \frac{a}{x} + \frac{b}{x^2} + o(\frac{1}{x^2})} \right) \quad (4.53)$$

$$= \frac{1}{x^{2-u}} \left(1 - \frac{a}{x} - \frac{b}{x^2} + \frac{\alpha^2}{x^2} + o(\frac{1}{x^2}) \right) \quad (4.54)$$

$$= \frac{1}{x^{2-u}} - a \frac{1}{x^{3-u}} + \frac{a^2 - b}{x^{4-u}} + o(\frac{1}{x^{4-u}}). \quad (4.55)$$

On voit bien que pour $u < -1$, l'expansion donne des termes d'ordre plus grands que 3. Je rappelle les expressions de a et b ^{9 10} :

$$a = -(2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x) \quad (4.56)$$

$$b = -(|V_y|^2 + |V_x|^2 + |W_{xy}|^2) + (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_x)(\epsilon_p - 2t_{pp} + W_y). \quad (4.57)$$

Le terme d'ordre 1 a alors pour coefficient $1 + 1 = 2$. Puis, si on note :

$$\sum_{\sigma=2}^3 G_{\sigma\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{2}{i\omega_n} + \frac{\alpha_{\mathbf{k}}}{(i\omega_n)^2} + \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{(i\omega_n)^3} \quad (4.58)$$

on obtient :

$$\alpha_{\mathbf{k}} = -2a - (2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x) \quad (4.59)$$

$$= 2(2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x) - (2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x) \quad (4.60)$$

$$= 2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x \quad (4.61)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = 2(a^2 - b) - (2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x)(-a) - |V_y|^2 - |V_x|^2 \quad (4.62)$$

$$= 2[(2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x)^2 + (|V_y|^2 + |V_x|^2 + |W_{xy}|^2)] \quad (4.63)$$

$$- (\epsilon_p - 2t_{pp} + W_x)(\epsilon_p - 2t_{pp} + W_y)] - (2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x)^2 - |V_y|^2 - |V_x|^2 \quad (4.64)$$

$$= (2(\epsilon_p - 2t_{pp}) + W_y + W_x)^2 + |V_y|^2 + |V_x|^2 + 2|W_{xy}|^2 - 2(\epsilon_p - 2t_{pp} + W_x)(\epsilon_p - 2t_{pp} + W_y). \quad (4.65)$$

Bien. Il faut maintenant calculer l'intégrale selon \mathbf{k} . Pour faire cela, je regarde les différentes valeurs des intégrales pour les types de termes que j'ai :

9. Voir l'expression de $\det(Z)$

10. J'ai intégré μ dans ϵ_p ici temporairement pour alléger un peu

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \lambda = \lambda \quad (4.66)$$

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \cos k_x = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \cos k_y = 0 \quad (4.67)$$

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \cos k_x \cos k_y = 0 \quad (4.68)$$

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \cos^2 k_x = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} \cos^2 k_y = \frac{1}{2} \quad (4.69)$$

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} |1 - e^{ik_x}|^2 = \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} |1 - e^{ik_y}|^2 = 2 \quad (4.70)$$

$$\frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}} |1 - e^{ik_x}|^2 |1 - e^{ik_y}|^2 = 4. \quad (4.71)$$

On utilisant toutes les formules ci-dessus et en ressortant μ de ϵ_p , on a finalement :

$$n_p = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\frac{2}{i\omega_n} + \frac{\alpha}{(i\omega_n)^2} + \frac{\gamma}{(i\omega_n)^3} \right) \quad (4.72)$$

$$\alpha = 2(\epsilon_p - 2t_{pp} - \mu) \quad (4.73)$$

$$\gamma = 4(\epsilon_p - 2t_{pp} - \mu)^2 + 4t_{pp}'^2 + 4t_{pd}^2 + 8t_{pp}^2 - 2(\epsilon_p - 2t_{pp} - \mu)^2 \quad (4.74)$$

$$= 2(\epsilon_p - 2t_{pp} - \mu)^2 + 4t_{pp}'^2 + 4t_{pd}^2 + 8t_{pp}^2. \quad (4.75)$$

On voit alors que jusqu'au troisième ordre en $i\omega_n$ ¹¹ :

$$n_p = \frac{4}{D\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left(\frac{x_p}{i\omega_n - x_p} - \frac{x_m}{i\omega_n - x_m} \right) \quad (4.76)$$

$$x_{p,m} = (A \pm D)/2 \quad (4.77)$$

$$A = \epsilon - 2t_{pp} - \mu \quad (4.78)$$

$$B = 2t_{pd}^2 + 4t_{pp}^2 + 2t_{pp}'^2 \quad (4.79)$$

$$D = \sqrt{A^2 + 4B}. \quad (4.80)$$

En effet si je ne considère qu'un terme de la somme, je trouve :

$$\begin{aligned} \beta n_p(i\omega_n) &= \frac{2}{D} \left(\frac{x_p}{i\omega_n} \left(1 + \frac{x_p}{i\omega_n} + \frac{x_p^2}{i\omega_n^2} \right) - \frac{x_m}{i\omega_n} \left(1 + \frac{x_m}{i\omega_n} + \frac{x_m^2}{i\omega_n^2} \right) \right) \\ &= 2 \left(\frac{x_p - x_m}{i\omega_n} + \frac{x_p^2 - x_m^2}{i\omega_n^2} + \frac{x_p^3 - x_m^3}{i\omega_n^3} \right) \\ &= \frac{2}{D} (x_p - x_m) \left(\frac{1}{i\omega_n} + \frac{x_p + x_m}{i\omega_n^2} + \frac{x_p^2 + x_p x_m + x_m^2}{i\omega_n^3} \right) \end{aligned}$$

11. Ce calcul simple est laissé au lecteur

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2}{D} D \left(\frac{1}{i\omega_n} + \frac{A}{i\omega_n^2} + \frac{1}{4} \frac{(A+D)^2 + (A+D)(A-D) + (A-D)^2}{i\omega_n^3} \right) \\
 &= \frac{2}{i\omega_n} + \frac{2A}{i\omega_n^2} + \frac{3A^2 + D^2}{2i\omega_n^3} \\
 &= \frac{2}{i\omega_n} + \frac{2A}{i\omega_n^2} + \frac{2A^2 + 2B}{i\omega_n^3}.
 \end{aligned}$$

En réalité, on remarque qu'en sommant sur toutes les fréquences de Matsubara - positives et négatives - les termes d'ordre impair disparaissent. C'était bien la peine de trouver une approximation à l'ordre 3. Enfin, le programme calcule l'énergie cinétique de l'impureté de la même façon, en comparant à l'énergie cinétique sans interactions et le même type de calcul serait nécessaire pour avoir des résultats plus probants. Je ne me suis cependant pas intéressé à l'énergie cinétique et son calcul est donc toujours approché.

4.2 L'Hamiltonien en représentation de Nambu

Le phénomène de la supraconductivité est basé sur l'association d'électrons par paires. Cette association - appelée paire de Cooper - est faite de deux électrons de quantités de mouvement opposées. Dans l'espace de travail, cela correspond à des paires d'électrons de quantités de mouvements \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$. Il faut cependant faire en sorte que la fonction de Green puisse inclure cet appariement. Pour cela, j'introduis les spineurs de Nambu :

$$\Psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\uparrow}(\mathbf{k}) \\ c_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.81)$$

On voit que cette base considère les particules de spin up comme des électrons et des particules de spin down comme des trous. Cela permet de faire intervenir directement dans la forme matricielle de la fonction de Green les corrélations entre deux particules ($\langle cc \rangle$) et non seulement entre une particule et un trou ($\langle cc^{\dagger} \rangle$) et ainsi d'introduire la supraconductivité. Puis, comme le modèle contient trois bandes, un simple opérateur $c(\mathbf{k})$ n'est pas suffisant pour décrire tous les sites atomiques. Il faut donc utiliser le spineur de Nambu à 6 composantes :

$$\Psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad \Psi_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} d_{\uparrow}(\mathbf{k}) \\ p_{\uparrow}^x(\mathbf{k}) \\ p_{\uparrow}^y(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad \Psi_{\downarrow}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} d_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \\ p_{\downarrow}^{x\dagger}(-\mathbf{k}) \\ p_{\downarrow}^{y\dagger}(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.82)$$

Je veux maintenant exprimer le Hamiltonien dans cette base des spineurs de Nambu pour pouvoir résoudre le problème d'impureté et introduire la supraconductivité. Je vais regarder seulement comment transformer le terme sans interactions, car on se rappelle que le terme d'interaction n'est pas diagonalisable dans cette base simple. Il faut alors exprimer $\mathbf{H}_0(\mathbf{k})$ comme une fonction des opérateurs $\Psi(\mathbf{k})$ seulement. Je cherche alors \mathbf{h}_N , une matrice 6×6 , telle que :

$$\mathbf{H}_0(\mathbf{k}) = \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}) \mathbf{h}_N(\mathbf{k}) \Psi(\mathbf{k}). \quad (4.83)$$

Pour les spins up, cela est trivial, rien ne change et $\mathbf{h}_{N\uparrow}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}_0(\mathbf{k})$. Cependant, pour les spins down, il faut travailler un peu :

$$\mathbf{H}_{0\downarrow}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} d_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}) & p_{\downarrow}^{x\dagger}(\mathbf{k}) & p_{\downarrow}^{y\dagger}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \mathbf{h}_0(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} d_{\downarrow}(\mathbf{k}) \\ p_{\downarrow}^x(\mathbf{k}) \\ p_{\downarrow}^y(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.84)$$

Avec ces notations, on a alors :

$$\mathbf{H}_{0\downarrow}(\mathbf{k}) = \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k}) \mathbf{h}_0(\mathbf{k}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}). \quad (4.85)$$

Cependant, je souhaite mettre les opérateurs de création - avec un \dagger - en première position dans le Hamiltonien (car c'est ce qui est fait pour les spins up et c'est la convention) :

$$\Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \mathbf{h}_{N\downarrow}(-\mathbf{k}) \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k}). \quad (4.86)$$

Je vais alors écrire le produit matriciel en termes d'une somme pour pouvoir écrire les relations d'anti-commutation des opérateurs pour trouver $\mathbf{h}_N(\mathbf{k})$. J'utilise la notation v_i pour écrire la $i^{\text{ième}}$ composante du vecteur v et A_{ij} pour écrire le terme de la matrice A à la ligne i et à la colonne j .

$$\mathbf{H}_{0\downarrow}(\mathbf{k}) = \sum_{m=1}^3 \sum_{m'=1}^3 \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k})_m \mathbf{h}_0(\mathbf{k})_{mm'} \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})_{m'} \quad (4.87)$$

$$= \sum_{m=1}^3 \sum_{m'=1}^3 \mathbf{h}_0(\mathbf{k})_{mm'} \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k})_m \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})_{m'} \quad (4.88)$$

$$= \sum_{m=1}^3 \sum_{m'=1}^3 \mathbf{h}_0(\mathbf{k})_{mm'} (\delta_{m,m'} - \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})_{m'} \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k})_m) \quad (4.89)$$

$$= \sum_{m=1}^3 \mathbf{h}_0(\mathbf{k})_{mm} - \sum_{m=1}^3 \sum_{m'=1}^3 \mathbf{h}_0(\mathbf{k})_{mm'} \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})_{m'} \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k})_m \quad (4.90)$$

$$= \text{Tr}(\mathbf{h}_0(\mathbf{k})) - \sum_{m=1}^3 \sum_{m'=1}^3 \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})_{m'} \mathbf{h}_0(\mathbf{k})_{mm'} \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k})_m \quad (4.91)$$

$$= \text{Tr}(\mathbf{h}_0(\mathbf{k})) - \sum_{m=1}^3 \sum_{m'=1}^3 \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k})_{m'} \mathbf{h}_0(\mathbf{k})_{m'm}^{\top} \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k})_m \quad (4.92)$$

$$= \text{Tr}(\mathbf{h}_0(\mathbf{k})) - \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) (\mathbf{h}_0(\mathbf{k}))^{\top} \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k}) \quad (4.93)$$

$$= \text{Tr}(\mathbf{h}_0(\mathbf{k})) - \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(-\mathbf{k}) \overline{\mathbf{h}_0(\mathbf{k})} \Psi_{\downarrow}(-\mathbf{k}). \quad (4.94)$$

Pour obtenir la dernière ligne, je remarque simplement que $\mathbf{h}_0(\mathbf{k})$ est une matrice hermitienne. Le premier terme est une constante et on peut décider de renormaliser l'énergie et éliminer ce terme. On a donc finalement :

$$\mathbf{h}_{N\downarrow}(\mathbf{k}) = -\overline{\mathbf{h}_0}(-\mathbf{k}). \quad (4.95)$$

Ensuite, je veux exprimer la fonction de Green dans cette représentation :

$$G^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} G_{\uparrow\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) & G_{\uparrow\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) \\ G_{\downarrow\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) & G_{\downarrow\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) \end{pmatrix} \quad (4.96)$$

$$G_{\uparrow\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \mathbf{h}_0(\mathbf{k}) - \Sigma_N(\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (4.97)$$

$$G_{\downarrow\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = i\omega_n - \mu + \overline{\mathbf{h}_0}(-\mathbf{k}) + \overline{\Sigma_N}(-\mathbf{k}, i\omega_n) \quad (4.98)$$

$$G_{\uparrow\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_{\downarrow\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma_A(\mathbf{k}, i\omega_n). \quad (4.99)$$

car la self-énergie se comporte exactement de la même façon que le Hamiltonien sans interactions pour un passage dans la base de Nambu.

4.3 Calcul de la rigidité superfluide

Comme je l'ai dit précédemment, je dois corriger les résultats de température critique qui n'est pas bien décrite seulement avec le paramètre d'ordre. Dans cette section, il ne s'agit pas de tenir compte de la phase antiferromagnétique, mais plutôt de considérer correctement la phase supraconductrice. En effet le paramètre d'ordre que je considère correspond aux corrélations entre électrons de spins opposés. Celui-ci donne une idée de la force d'appariement des paires de Cooper, mais non la cohérence de phase supraconductrice. Cependant, cette cohérence de phase est un des ingrédients nécessaires pour qu'il y ait supraconductivité. Je vais alors donc voir comment corriger les résultats pour tenir compte de cette omission. Pour cela, je vais m'inspirer des calculs faits dans la référence [49] par Olivier Simard. En effet, ce mémoire de maîtrise réalisé par un ancien étudiant de maîtrise dans le groupe d'André-Marie introduit la rigidité superfluide qui caractérise cette cohérence de phase et donne les clés pour la calculer. Cette rigidité peut ensuite être utilisée pour corriger les températures critiques trouvées dans l'approche champ moyen.

4.3.1 Substitutions de Peierls

Pour calculer la rigidité superfluide, je dois calculer la fonction de corrélation courant-courant qui est la dérivée du courant par rapport au potentiel vecteur \mathbf{A} . J'introduis donc une dépendance au potentiel vecteur dans le Hamiltonien. Je peux introduire cette dépendance au premier ordre, plutôt simplement, en utilisant la substitution de Peierls [64]. Cette substitution introduit une dépendance en \mathbf{A} au premier ordre et permet donc de calculer la rigidité superfluide. Je travaille dans la base de Nambu introduite juste au-dessus et il convient de faire un peu attention au moment de faire cette substitution. En effet, la procédure n'est pas exactement la même qu'elle s'applique sur des états de trous ou d'électrons. Pour les électrons il suffit de remplacer \mathbf{k} par $\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A} = \mathbf{k} - \mathbf{A}$.¹² Pour les trous, on remplace ce terme par $\mathbf{k} + \mathbf{A}$. On voit que cette substitution ne permet pas de tenir compte des termes hors diagonaux qui sont des termes couplant les trous aux électrons. On supposera alors que ces termes ne dépendent pas du potentiel vecteur.

12. Rappelez-vous que j'ai pris $e = c = \hbar = 1$

4.3.2 Formule de la rigidité superfluide

La formule dérivée en (5.15) dans [49] est valide pour un espace de Nambu quelconque et donc pour le système à 3 bandes. Il n'est donc pas nécessaire de refaire le calcul. Je le reproduis tout de même ici car le Hamiltonien à trois bandes que je considère ici n'est pas réel et je voulais tenter de clarifier un peu les choses pour mon système en particulier. J'utilise la même notation qu'Olivier :

$$\text{Tr} = \frac{1}{N} \sum_{i\omega_n} \sum_{\mathbf{k}} \text{tr} \quad (4.100)$$

où la trace tr est faite sur une matrice 6x6 (3 bandes et 3 spins). L'énergie libre dépend du potentiel vecteur et vaut ¹³ :

$$F = -\frac{1}{\beta} \text{Tr} \ln(-G^{-1})(\mathbf{A}) \quad (4.101)$$

$$\rho_{ab} = \frac{1}{V} \frac{\partial^2 F[G(\mathbf{A})]}{\partial A_a \partial A_b} \Big|_{\mathbf{A}=0}. \quad (4.102)$$

On cherche donc ici à calculer ρ_{ab} où a et b sont les axes selon lesquels on veut calculer ρ . On cherche à calculer la rigidité superfluide dans le plan et on prendra alors $a = b = x$ ¹⁴ Voici donc les étapes du calcul en abrégé. Les formules nécessaires aux différentes transformations - différentiation et intégration par partie - sont situées en dessous du calcul :

$$\rho_{ab} = -\frac{1}{\beta V} \frac{\partial}{\partial A_b} \text{Tr} \left[\frac{\partial G^{-1}}{\partial A_a} G \right] \Big|_{\mathbf{A}=0} \quad (4.103)$$

$$= -\frac{1}{\beta V} \text{Tr} \left[\frac{\partial^2 G^{-1}}{\partial A_a \partial A_b} G + \frac{\partial G^{-1}}{\partial A_a} \frac{\partial G}{\partial A_b} \right] \Big|_{\mathbf{A}=0} \quad (4.104)$$

$$= -\frac{1}{\beta V} \text{Tr} \left[\frac{\partial^2 G^{-1}}{\partial A_a \partial A_b} G - \frac{\partial G^{-1}}{\partial A_a} G \frac{\partial G^{-1}}{\partial A_b} G \right] \Big|_{\mathbf{A}=0} \quad (4.105)$$

$$= \frac{1}{\beta V} \text{Tr} \left[\partial_{k_a k_b}^2 \mathbf{h}_N G + \tau_3 \partial_{k_a} \mathbf{h}_N G \tau_3 \partial_{k_b} \mathbf{h}_N G \right]. \quad (4.106)$$

On peut cependant obtenir une expression qui ne fait intervenir que les dérivées premières du Hamiltonien. Il faut, pour cela, intégrer par partie le premier terme de la dernière équation. Il n'y a pas d'intégrale donc le terme d'*intégration par parties* n'est pas totalement adéquat, mais on considère que la somme sur \mathbf{k} peut être vue comme une intégrale ¹⁵. Les fonctions $\partial_{k_a} \mathbf{h}_N$ et G sont bien sûr périodiques selon \mathbf{k} de période la zone de Brillouin.

$$\text{Tr} \left[\tau_3 \partial_{k_a k_b}^2 \mathbf{h}_N G \right] = \frac{1}{N} \sum_{i\omega_n} \sum_{\sigma} \sum_c \sum_{\mathbf{k}} \partial_{k_a k_b}^2 \mathbf{h}_N G \quad (4.107)$$

$$= \frac{1}{N} \left(\sum_{i\omega_n} \sum_{\sigma} \sum_c [\partial_{k_a} \mathbf{h}_N G]_{\text{Z.B.}} \right) - \text{Tr} [\partial_{k_a} \mathbf{h}_N \partial_{k_b} G] \quad (4.108)$$

13. Il n'est possible d'écrire cette expression que si l'on néglige les corrections de vertex, c'est-à-dire si on suppose $\partial_{k_a} \mathbf{h}_N = \partial_{k_a} G^{-1}$

14. On aurait pu prendre $a = b = y$ également et cela n'aurait rien changé vu la symétrie du problème.

15. Ce qui est exactement le cas quand on passe au cas continu

$$= -\text{Tr} [\partial_{k_a} \mathbf{h}_N \partial_{k_b} G] \quad (4.109)$$

$$= \text{Tr} [\partial_{k_a} \mathbf{h}_N G \partial_{k_b} G^{-1} G] \quad (4.110)$$

$$= -\text{Tr} [\partial_{k_a} \mathbf{h}_N G \partial_{k_b} \mathbf{h}_N G] \quad (4.111)$$

$$\rho_{ab} = \frac{1}{\beta V} \text{Tr} [\tau_3 \partial_{k_a} \mathbf{h}_N G \tau_3 \partial_{k_b} \mathbf{h}_N G - \partial_{k_a} \mathbf{h}_N G \partial_{k_b} \mathbf{h}_N G]. \quad (4.112)$$

On arrive à une formule ne faisant intervenir que la fonction de Green et les dérivées du Hamiltonien sur le réseau. Grâce aux résultats du programme CT-Seg-3B, je peux donc calculer cette rigidité superfluide. Voici donc toutes les formules permettant d'avancer dans le calcul :

$$G^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n, \mathbf{A}) = \begin{pmatrix} G_{\uparrow\uparrow}^{-1}(\mathbf{k} - \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}, i\omega_n) & G_{\uparrow\downarrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) \\ G_{\downarrow\uparrow}^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) & G_{\downarrow\downarrow}^{-1}(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}, i\omega_n) \end{pmatrix} \quad (4.113)$$

$$\frac{\partial G^{-1}}{\partial A_a} = \begin{pmatrix} -\partial_{A_a} \mathbf{h}_{N\uparrow}(\mathbf{k} - \mathbf{A}) & 0 \\ 0 & -\partial_{A_a} \mathbf{h}_{N\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{A}) \end{pmatrix} = \tau_3 \partial_{k_a} \mathbf{h}_N \quad (4.114)$$

$$\frac{\partial G^{-1}}{\partial k_a} = \begin{pmatrix} -\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow}(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & -\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\downarrow}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = -\partial_{k_a} \mathbf{h}_N \quad (4.115)$$

$$\frac{\partial^2 G^{-1}}{\partial A_a \partial A_b} = \begin{pmatrix} -\partial_{k_b} \partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow}(\mathbf{k} - \mathbf{A}) & 0 \\ 0 & -\partial_{k_b} \partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\downarrow}(\mathbf{k} + \mathbf{A}) \end{pmatrix} = -\partial_{k_b k_a} \mathbf{h}_N \quad (4.116)$$

$$\mathcal{I} = G G^{-1}$$

$$0 = (\partial_{A_a} G) G^{-1} + G \partial_{A_a} G^{-1}$$

$$\partial_{A_a} G = -G (\partial_{A_a} G^{-1}) G. \quad (4.117)$$

En réalité et comme précisé dans le mémoire d'Olivier [49], certains termes $\partial_{k_a} \mathbf{h}_N$ sont remplacés par des dérivées premières de G^{-1} par rapport à \mathbf{k} (voir Équation 4.115)¹⁶. Cela permet de considérer les corrections de vertex - ou en d'autres termes de considérer que la self-énergie a une dépendance non triviale en \mathbf{k} . Ce type de terme est également calculable simplement à partir de la fonction de Green qui sort du programme CT-Seg-3B. Finalement, je choisis pour la susceptibilité la formule :

$$\rho_{ab} = \frac{1}{\beta V} \text{Tr} [-\tau_3 \partial_{k_a} \mathbf{h}_N G \tau_3 \partial_{k_b} G^{-1} G + \partial_{k_a} \mathbf{h}_N G \partial_{k_b} G^{-1} G]. \quad (4.118)$$

Où je prends pour $\partial_{k_b} G^{-1}$ la dérivée par différence finie de G^{-1} et je retire les termes hors-diagonaux (j'avais supposé que ces termes ne dépendent pas du potentiel vecteur).

Ensuite, il faut préciser de quelle fonction de Green je parle dans ces expressions. En effet, la rigidité superfluide telle que calculée ici nécessite la fonction de Green sur la zone de Brillouin. Or, dans le programme CT-Seg-3B, je la calcule sur l'impureté, car la self-énergie est dans l'espace réel. Cette fonction de Green, comme je l'ai dit précédemment, n'est donc pas dans la base réciproque directement, mais dans une base mixte. Il me faut donc calculer la fonction de Green sur la zone de Brillouin initiale. Il est possible de la récupérer en effectuant une procédure appelée la périodisation¹⁷. J'utilise alors l'équation (10) de la référence [65]

16. Je vous rappelle que dans la version simplifiée que je présente ici, j'ai supposé $\partial_{k_a} \mathbf{h}_N = \partial_{k_a} G^{-1}$

17. Je perds une partie de la périodicité de la fonction de Green en projetant sur une impureté non purement locale. Je cherche donc à restaurer cette périodicité. Cette procédure perd une partie de l'information, mais elle est nécessaire ici.

que je rappelle ici :

$$G_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} G_{\sigma\sigma'}(\tilde{\mathbf{k}}, \mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, i\omega_n). \quad (4.119)$$

Dans cette expression, $\tilde{\mathbf{k}}$ est tel que $\mathbf{k} = \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}$ avec $\mathbf{K} \in \{(0, 0), (0, \pi), (\pi, 0), (\pi, \pi)\}$ - il en existe bien un seul, à 2π près. Cette expression correspond environ à une transformée de Fourier sur une partie seulement de la transformée de l'espace. Cependant il ne s'agit pas exactement d'une transformée de Fourier, car on supprime les termes dits non diagonaux $G_{\sigma\sigma'}(\tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}', \tilde{\mathbf{k}} + \mathbf{K}, i\omega_n)$ [65]. J'ai choisi de faire cette transformation sur la fonction de Green et non pas sur la self-énergie ou sur une autre quantité pour les raisons énoncées dans l'article - notamment le fait que l'on conserve le plus d'information en faisant cela.

4.3.3 Correction de la vitesse

Ensuite, il y a une seconde différence entre le Hamiltonien que j'ai utilisé jusqu'ici et celui utilisé dans le mémoire d'Olivier. En effet, dans ce mémoire, j'ai choisi une base dans laquelle j'ai considéré que les atomes au sein d'une maille élémentaire sont situés au même endroit. Cependant, comme j'étudie le couplage au potentiel vecteur qui dépend de la position, cette base ne peut être utilisée pour les calculs sans faire une trop grosse approximation. Il me faut alors introduire une correction [66] - formule (14). Elle s'écrit ici :

$$v_{\uparrow\text{tot}}(\mathbf{k}) = \partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow}(\mathbf{k}) + v_{\uparrow c}(\mathbf{k}) \quad (4.120)$$

$$v_{\uparrow c}(\mathbf{k}) = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & t_{pd}(1 - e^{-ik_x}) & 0 \\ -t_{pd}(1 - e^{ik_x}) & 0 & t_{pp}(1 - e^{ik_x})(1 - e^{-ik_y}) \\ 0 & -t_{pp}(1 - e^{-ik_x})(1 - e^{ik_y}) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.121)$$

$$v_{\downarrow\text{tot}}(\mathbf{k}) = \partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\downarrow}(\mathbf{k}) + v_{\downarrow c}(\mathbf{k}) \quad (4.122)$$

$$v_{\downarrow c}(\mathbf{k}) = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -t_{pd}(1 - e^{-ik_x}) & 0 \\ t_{pd}(1 - e^{ik_x}) & 0 & -t_{pp}(1 - e^{ik_x})(1 - e^{-ik_y}) \\ 0 & t_{pp}(1 - e^{-ik_x})(1 - e^{ik_y}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.123)$$

Remarquez que les deux corrections sont opposées¹⁸. En effet, le passage de la vitesse dans la représentation de Nambu implique le conjugué de la vitesse prise en $-\mathbf{k}$, c'est-à-dire $v_{\downarrow c}(\mathbf{k}) = v_{\uparrow c}(-\mathbf{k})$.

J'ai implémenté cette formule dans le programme CT-Seg-3B, mais je remarque que l'ajout de ce terme ne change pas la valeur de la rigidité superfluide. Je démontre par le calcul compliqué suivant pourquoi pour le Hamiltonien choisi, cette correction ne change rien à la formule finale. Ce n'est donc pas un calcul général.

Il faut d'abord alléger un peu les notations, j'en introduis de nouvelles en partitionnant selon les spins up et down :

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad (4.124)$$

18. Seul un signe moins les sépare

$$v_{\text{tot}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} v & 0 \\ 0 & w \end{pmatrix}. \quad (4.125)$$

Avec ces notations, un terme dans (4.112) vaut :

$$\begin{pmatrix} v & 0 \\ 0 & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v & 0 \\ 0 & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} v & 0 \\ 0 & -w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v & 0 \\ 0 & -w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad (4.126)$$

$$\begin{pmatrix} vA & vB \\ wC & wD \end{pmatrix} \begin{pmatrix} vA & vB \\ wC & wD \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} vA & vB \\ -wC & -wD \end{pmatrix} \begin{pmatrix} vA & vB \\ -wC & -wD \end{pmatrix} \quad (4.127)$$

$$= \begin{pmatrix} (vA)^2 + vBwC - ((vA)^2 - vBwC) & \dots \\ \dots & wCvB + (wD)^2 - (-wCvB + (wD)^2) \end{pmatrix} \quad (4.128)$$

$$= \begin{pmatrix} 2vBwC & \dots \\ \dots & 2wCvB \end{pmatrix}. \quad (4.129)$$

J'ai utilisé des ellipses, car seule la trace m'intéresse. Je regarde maintenant seulement le premier terme¹⁹ :

$$vBwC = (\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow} + v_{\uparrow c})B(\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\downarrow} + v_{\downarrow c})C \quad (4.130)$$

$$= \partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow} B \partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\downarrow} C + v_{\uparrow c} B (\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\downarrow} + v_{\downarrow c})C + (\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow} + v_{\uparrow c})B v_{\downarrow c} C. \quad (4.131)$$

Je veux démontrer que la somme des deux derniers termes a une trace nulle. Je vais plutôt démontrer ici que les termes diagonaux de ces deux termes sont tous nuls. Je fais le calcul pour le troisième terme dans l'expression²⁰. Je commence donc par regarder ce que valent B et C. J'utilise ici encore la formule d'inversion de matrice 2×2 par blocs :

$$G^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (4.132)$$

$$b = c = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.133)$$

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \begin{pmatrix} A & -Abd^{-1} \\ -d^{-1}cA & D \end{pmatrix}. \quad (4.134)$$

Comme les matrices b et c sont simples²¹, on peut exprimer B et C simplement en fonction de A et d^{-1} ²². On trouve la formule :

$$B_{ij} = -\gamma A_{i1} d_{1j}^{-1} \quad (4.135)$$

$$C_{ij} = -\gamma A_{1j} d_{i1}^{-1}. \quad (4.136)$$

19. Le deuxième terme ayant exactement la même trace

20. Celle pour le deuxième terme est analogue bien sûr

21. Car on en considère des interactions que sur les sites de cuivre

22. Je suppose que d est inversible, je vous invite à chercher les cas où ce n'est pas vrai

Je nomme $\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow} + v_{\uparrow c} \equiv E$ et quand j'écris d_{ij}^{-1} , il s'agit toujours du terme ij de la matrice d^{-1} .

$$(\partial_{k_a} \mathbf{h}_{N\uparrow} + v_{\uparrow c}) B v_{\downarrow c} C = E B v_{\downarrow c} C \quad (4.137)$$

$$(E B v_{\downarrow c} C)_{ii} = \gamma^2 \sum_{k,l,m \in \{1,2,3\}} E_{ik} B_{kl} (v_{\downarrow c})_{lm} C_{mi} \quad (4.138)$$

$$= \gamma^2 \sum_{k,l,m \in \{1,2,3\}} E_{ik} A_{k1} d_{1l}^{-1} (v_{\downarrow c})_{lm} A_{1i} d_{m1}^{-1} \quad (4.139)$$

$$= \gamma^2 \sum_{k=1}^3 E_{ik} A_{k1} A_{1i} \sum_{l,m \in \{1,2,3\}} d_{1l}^{-1} (v_{\downarrow c})_{lm} d_{m1}^{-1} \quad (4.140)$$

$$= (\text{qqchose}) \sum_{l,m \in \{1,2,3\}} d_{1l}^{-1} (v_{\downarrow c})_{lm} d_{m1}^{-1} \quad (4.141)$$

$$\sum_{l,m \in \{1,2,3\}} d_{1l}^{-1} (v_{\downarrow c})_{lm} d_{m1}^{-1} = d_{11}^{-1} (v_{\downarrow c})_{12} d_{21}^{-1} + d_{12}^{-1} (v_{\downarrow c})_{21} d_{11}^{-1} + d_{12}^{-1} (v_{\downarrow c})_{23} d_{31}^{-1} + d_{13}^{-1} (v_{\downarrow c})_{32} d_{21}^{-1}. \quad (4.142)$$

Il suffit donc de démontrer que (4.142) s'annule. Ici, il faut se souvenir qui sont d et $v_{\downarrow c}$. On avait remarqué plus tôt que la correction de la vitesse ressemblait beaucoup au Hamiltonien qui ressemblait beaucoup à la fonction de Green inverse. Ici, on a les relations suivantes²³ :

$$(v_{\downarrow c})_{12} = \frac{i}{2} d_{12} \quad (4.143)$$

$$(v_{\downarrow c})_{23} = \frac{i}{2} d_{23} \quad (4.144)$$

$$(v_{\downarrow c})_{21} = -\frac{i}{2} d_{21} \quad (4.145)$$

$$(v_{\downarrow c})_{32} = -\frac{i}{2} d_{32}. \quad (4.146)$$

On remplace cela dans l'expression ci-dessus et on utilise les identités liant une matrice à son inverse :

$$\frac{2}{i} \sum_{l,m \in \{1,2,3\}} d_{1l}^{-1} (v_{\downarrow c})_{lm} d_{m1}^{-1} = d_{11}^{-1} d_{12} d_{21}^{-1} - d_{12}^{-1} d_{21} d_{11}^{-1} + d_{12}^{-1} d_{23} d_{31}^{-1} - d_{13}^{-1} d_{32} d_{21}^{-1} \quad (4.147)$$

$$d_{11}^{-1} d_{12} d_{21}^{-1} - d_{12}^{-1} d_{21} d_{11}^{-1} = -(d_{12}^{-1} d_{22} + d_{13}^{-1} d_{32}) d_{21}^{-1} + d_{12}^{-1} (d_{22} d_{21}^{-1} + d_{23} d_{31}^{-1}) \quad (4.148)$$

$$= -d_{13}^{-1} d_{32} d_{21}^{-1} + d_{12}^{-1} d_{23} d_{31}^{-1} \quad (4.149)$$

$$\frac{2}{i} \sum_{l,m \in \{1,2,3\}} d_{1l}^{-1} (v_{\downarrow c})_{lm} d_{m1}^{-1} = 2(d_{11}^{-1} d_{12} d_{21}^{-1} - d_{12}^{-1} d_{21} d_{11}^{-1}). \quad (4.150)$$

On connaît exactement d donc on va exprimer les termes de d^{-1} que l'on cherche en fonction de ceux de d ²⁴ :

$$d_{21}^{-1} = -\frac{1}{\det(d)} (d_{21} d_{33} - d_{23} d_{31}) \quad (4.151)$$

23. Je vous conseille de vérifier cela par vous-même pour mieux suivre

24. On utilise la formule $d^{-1} = \frac{1}{\det(d)} \text{Adj}(d)$

$$d_{12}^{-1} = -\frac{1}{\det(d)}(d_{12}d_{33} - d_{13}d_{32}). \quad (4.152)$$

Donc finalement :

$$-\det(d)d_{12}d_{21}^{-1} = d_{12}d_{21}d_{33} - d_{12}d_{23}d_{31} \quad (4.153)$$

$$-\det(d)d_{21}d_{12}^{-1} = d_{21}d_{12}d_{33} - d_{21}d_{13}d_{32}. \quad (4.154)$$

En retournant à la définition de la fonction de Green inverse (qui est exactement d), on remarque :

$$d_{12}d_{23}d_{31} = d_{21}d_{13}d_{32}. \quad (4.155)$$

On a donc bien prouvé que pour le Hamiltonien, il n'est pas nécessaire de tenir compte de la correction de vitesse. Ce n'est pas très utile, certes car implémenter cette correction a pris beaucoup moins de temps que de faire la preuve, mais cela explique le comportement que j'ai observé.

4.4 Optimisation du cycle Monte-Carlo

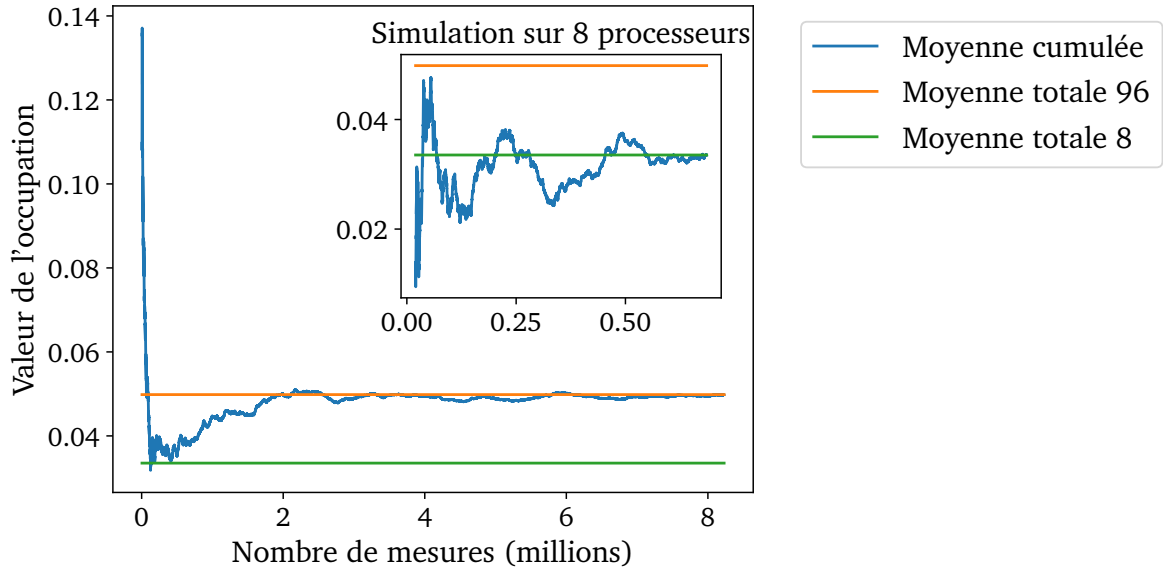
Pour pouvoir effectuer une simulation Monte-Carlo et obtenir de bons résultats, il me fallait choisir de bons paramètres de simulations. Comme mentionné en 2.2.3, il y a tout un tas de paramètres que l'on peut choisir dans le cycle de convergence.

Nombre de processeurs Rappelez vous qu'une simulation Monte-Carlo doit amasser des mesures d'observables séparées par des pas dans l'espace des états disponibles. Plus on a besoin de précision sur le résultat final, plus on a besoin de mesures.

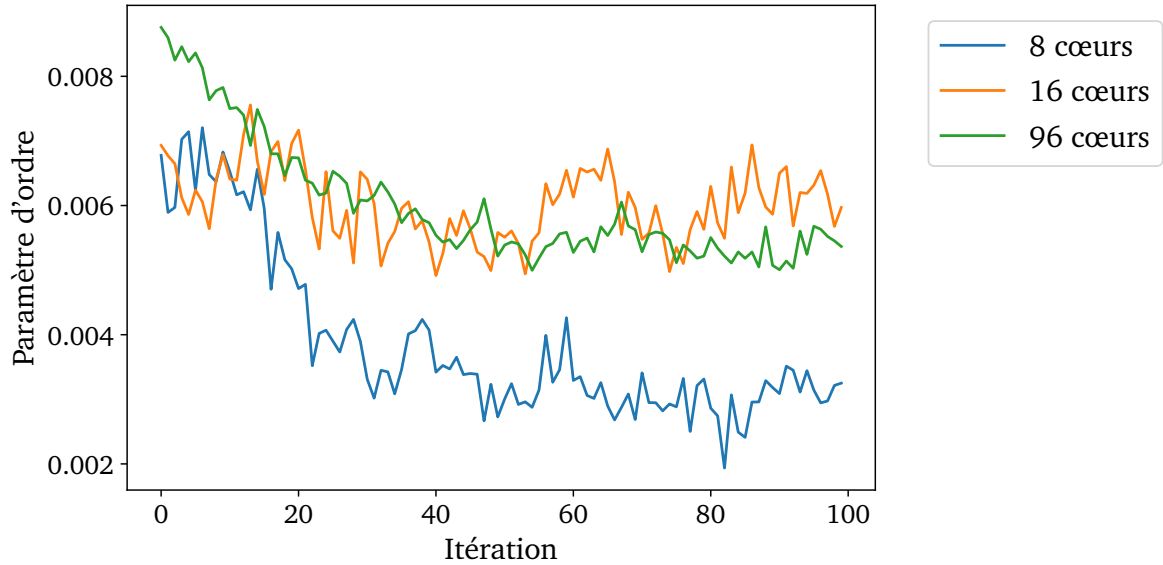
Cependant, il faut un certain temps pour pouvoir faire un pas et une mesure et si ce temps devient significatif ou si le nombre de mesures nécessaires devient trop haut, la simulation peut prendre plus de temps que disponible. On pense tout de suite à paralléliser la simulation Monte-Carlo, mais sa nature est séquentielle. Le but étant d'amasser des statistiques en se déplaçant petit à petit dans l'espace des états, il est impossible d'introduire directement une parallélisation. Cependant, à défaut de paralléliser une simulation Monte-Carlo, il est possible de lancer plusieurs simulations indépendantes. En effet, on peut voir une telle simulation comme une réalisation d'une variable aléatoire. Pour avoir la moyenne d'une variable aléatoire, il suffit donc de regarder plusieurs²⁵ réalisations indépendantes. C'est donc ce que je fais ici avec le programme CT-Seg-3B, je lance un nombre N de simulations indépendantes et je regarde la moyenne des résultats obtenus - pondéré avec le nombre de mesures réalisées qui peut être différent selon les simulations.

Augmenter le nombre de processeurs permet donc simplement d'amasser plus de mesures plus vite. Cependant, pour chaque processeur, il faut faire l'étape de thermalisation. Donc au lieu de faire une thermalisation, on a besoin de faire N thermalisations ce qui correspond à une perte d'un temps de processeur $(N - 1)\tau_{th}$. Ce temps ne correspond en réalité pas à du temps perdu, et ce à cause de la forte corrélation des mesures entre elles. En effet, souvenez vous qu'en 4.1.1, l'erreur convergait doucement, ce qui indiquait une grosse corrélation. Ces $(N - 1)$ thermalisations supplémentaires permettent donc de décorrélérer les simulations et ainsi de gagner en précision sur le résultat final. Il ne faut donc pas hésiter à faire de la parallélisation tant que le temps de thermalisation est suffisant.

25. Encore une fois, il va falloir préciser ce que veux dire «plusieurs»



(a) Convergence d'une simulation Monte-Carlo (96 et 8 cœurs)



(b) Convergence du cycle d'autocohérence avec le nombre de cœurs

FIGURE 4.4 – Étude numérique de la simulation Monte-Carlo et du cycle d'autocohérence

Mais comment choisir ce nombre de processeurs N . Il est bien sûr à choisir avec le temps de simulation, car il y est intimement relié. Mais de par ce lien, il suffit de fixer le temps de simulation et regarder comment N affecte les résultats. Je présente sur la figure 4.4a la valeur de l'observable occupation sur les sites de cuivre en fonction du nombre de mesures accumulées pour deux valeurs de N . Tout d'abord, on voit que pour un faible nombre de mesures, la valeur est très instable. Cela est dû au fait que la variance de la variable aléatoire *observable* est très grande. Ce premier pic et ces variations rapides s'observent, quelque soit le temps de

thermalisation. Ensuite - et très lentement - la valeur semble s'équilibrer autour d'une valeur proche de 0.03. Pour $N = 96$, je suppose donc que la simulation a convergé. En revanche, on voit clairement que pour $N = 8$, la simulation n'a pas convergé. L'erreur semble être autour de $1/6$ soit 17%, ce qui est grand, mais pas considérable. En revanche, si l'on regarde le cycle CDMFT en entier, une non-convergence des simulations successives peut entraîner une grande erreur. Sur la figure 4.4b, je trace le paramètre d'ordre supraconducteur en fonction de l'itération CDMFT. Je vois que si le nombre de processeurs est insuffisant ($N = 8$), le cycle converge vers une mauvaise valeur. Pour des valeurs plus grandes ($N = 16 - 96$), j'observe que la convergence se fait vers un même point, mais que les fluctuations restantes sont beaucoup plus grandes pour $N = 16$. Au vu de la précision dont j'ai besoin sur la moyenne finale (je choisis une erreur autour de 5%) et de l'architecture des serveurs de calcul (Cedar a des noeuds de 48 processeurs), je choisis un nombre 96 de processeurs pour mes simulations. Il faudrait en théorie revoir cette valeur à la baisse ou à la hausse en fonction des régimes de paramètres physiques. Je ne fais ça, en réalité, que rarement dans des cas pathologiques. Une idée pourrait être d'adapter cette valeur en fonction de la valeur du signe, qui donne en général une bonne idée de la précision nécessaire du résultat.

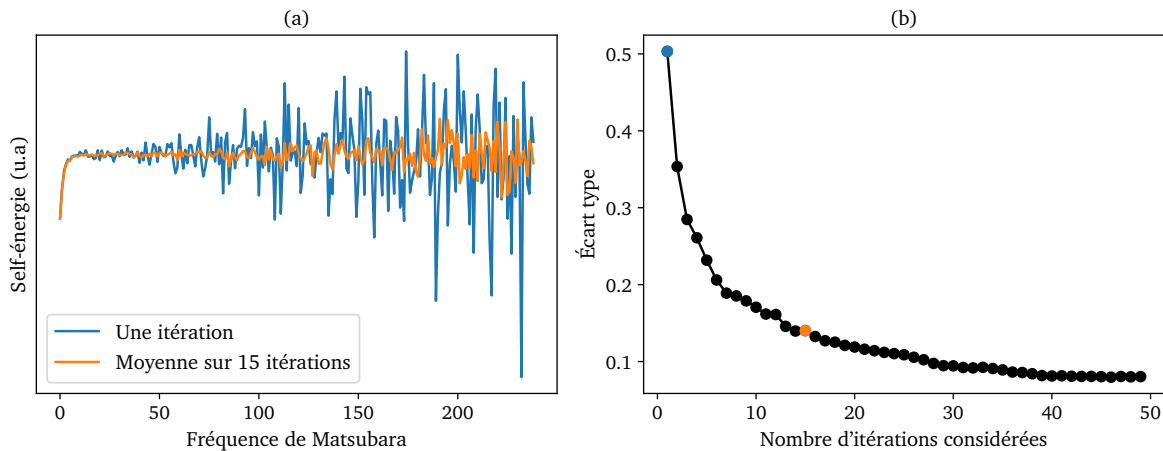


FIGURE 4.5 – À gauche (a) : self-énergie anormale en fonction de l'indice de fréquence de Matsubara. Pour les grandes fréquences, la valeur est très bruyante. On observe que ce bruit est diminué en moyennant la valeur sur plusieurs itérations. À droite (b) : Écart type de la queue de la self-énergie (à partir de la fréquence $n = 15$). On observe que l'écart type diminue avec le nombre d'itérations sur lesquels on moyenne. Les points bleu et orange correspondent à l'écart type des queues des courbes de la figure de gauche

Nombre d'itérations Le programme CT-Seg-3B enchaîne les simulations Monte-Carlo - qu'on espère assez précises - pour faire converger la self-énergie vers sa valeur dans l'approximation CDMFT. Cependant, et au vu de la méthode employée, le résultat final n'est pas une valeur fixée, mais fluctue encore. Ces fluctuations sont dues au fait que la méthode de convergence de la self-énergie est d'itérer le système d'équations, ce qui n'est pas une façon très contrôlée d'observer une convergence, mais également à la précision des simulations Monte-Carlo. Comme je viens de le montrer sur la figure 4.4b, plus le nombre de processeurs est

grand moins l'observable fluctue autour de sa valeur d'équilibre, mais elle ne se fixe pas à sa valeur finale. De plus, en réalité la self-énergie ne converge jamais et le bruit résultant de la simulation rend même sa valeur extrêmement volatile pour les grandes fréquences de Matsubara (voir figure 4.5). Il faut donc un critère pour considérer que la simulation a convergé ainsi qu'une manière de choisir quel résultat garder - si le résultat varie en fonction de l'itération d'arrêt choisi, cela ne peut pas être bon.

Pour observer la convergence d'une simulation, je ne regarde pas la self-énergie directement, mais les observables d'intérêt. Je regarde généralement l'occupation totale qui est une quantité qui converge assez bien en général. Elle correspond à la somme sur les fréquences de Matsubara de la trace de la fonction de Green totale. Cela donne donc une idée de la convergence de la fonction de Green entre deux mêmes sites. Ensuite, si je regarde une phase avec un paramètre d'ordre, je regarde comment celui-ci se comporte avec le nombre d'itérations. Dans la phase supraconductrice, je regarde alors la convergence de la partie anormale de la fonction de Green, dans les phases anti- et ferromagnétiques, je regarde la valeur de la somme pondérée des spins sur les sites de l'amas.

Il peut cependant arriver que certaines phases mettent plus de temps à se manifester (par exemple la phase antiferromagnétique) aux endroits d'une transition de phase. Dans ce cas là, si je suis à l'endroit d'une telle transition, j'attends d'observer une stabilisation des observables sur un plus grand nombre d'itérations.

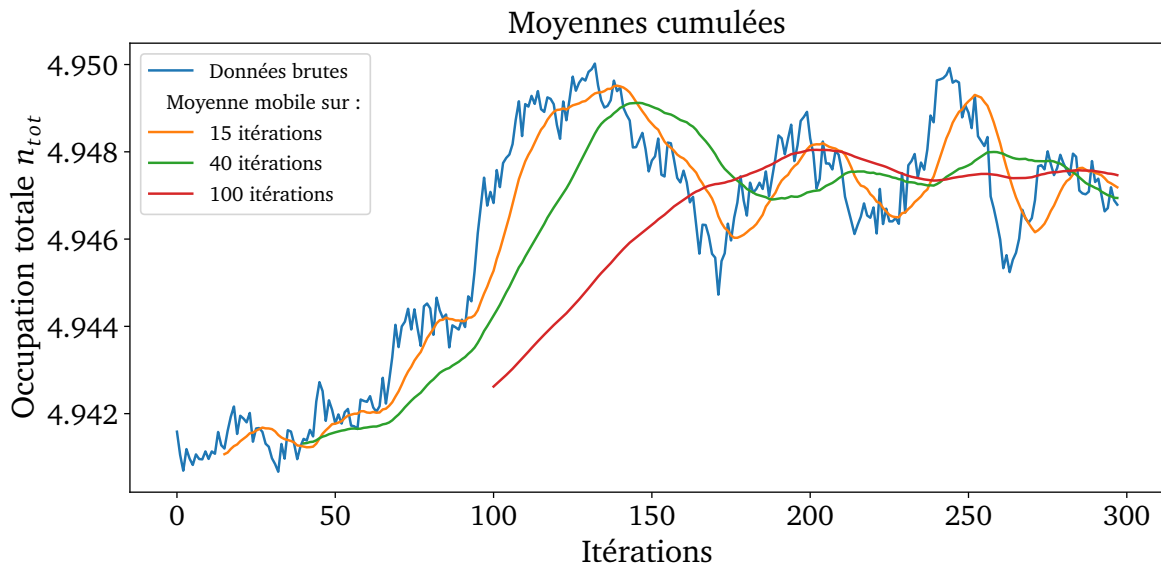


FIGURE 4.6 – Valeur de l'occupation totale en fonction de l'itération Monte-Carlo à un point proche d'une transition de phase. Les courbes oranges, vertes et rouges sont simplement une moyenne mobile de la courbe bleue sur i itérations (i prenant les valeurs 15, 40 et 100 respectivement). On observe une grande difficulté de convergence de la simulation. Dans un tel cas, proche d'une transition de phase généralement, il faut faire la moyenne sur plus de points pour avoir une valeur stable de l'observable. Ici, le dopage vaut environ $5 - 4.95 = 5\%$. L'erreur sur le dopage est donc de l'ordre de $\frac{0.002}{0.05} = 4\%$. Ce n'est pas très significatif.

Enfin, quand je remarque qu'une simulation a convergé, j'effectue $n = 15$ itérations supplémentaires pour obtenir une juste valeur des observables, moyennées sur ces n itérations après la convergence constatée. Cela permet de diminuer l'incertitude sur les observables et également le bruit provenant de la simulation Monte-Carlo (et des faibles valeurs de signe). Je présente l'effet de cette moyenne sur la précision des observables sur la figure 4.5. Cette valeur de $n = 15$ est bonne pour la plupart des simulations pour lesquelles la période des oscillations autour de la valeur moyenne est faible. Cependant et proche d'une transition, il arrive que les oscillations autour de la valeur moyenne - la limite supposée - atteigne les 50 itérations (voir figure 4.6). Dans ce cas, on observe que la valeur moyenne elle-même subit des oscillations, il faut alors changer la valeur n ou bien arrêter la simulation quand l'observable suivie atteint la valeur moyenne des oscillations.

4.5 Pseudogap

Je fais dans cette annexe une rapide description du régime de pseudogap rencontré lors de l'exploration de l'espace des paramètres.

État Normal Sur la figure 3.17²⁶, en partant du demi-remplissage et en baissant le potentiel chimique, j'observe un régime dans lequel la pente de $n_{tot}(\mu)$ augmente avant de passer l'hystérèse. Ce régime est relié dans la référence [52] à un régime de pseudogap. Cette phase correspond à l'apparition d'un gap *mou* [67] dans la densité d'états. J'appelle cela un gap *mou* ici, car il s'agit d'un gap dans lequel la densité d'états ne descend pas tout à fait à zéro. Un gap dit *dur* est, à l'inverse, un gap dans lequel la densité d'états descend à zéro. On comprend mieux pourquoi le terme pseudogap a été choisi pour désigner une telle phase. Un gap mou peut provenir par exemple d'un gap de la densité d'états dans une direction \mathbf{k} particulière. Ce pseudogap est devenu un sujet central dans l'étude des supraconducteurs à haute température critique et de nombreux travaux expérimentaux et théoriques s'y intéressent [67, 68, 69].

Je veux montrer ici que cette phase est également visible dans le modèle à trois bandes dans le régime de paramètre que j'étudie. En me plaçant au point de départ(1.4), je trace sur la Figure 4.7 la densité d'états proche de l'énergie nulle pour certaines valeurs du potentiel chimique. Les densités d'état sont obtenus ici en utilisant le programme Ω Maxent [46].

Tout d'abord, du côté sur dopé (représenté par $\mu = 11.669$), on observe le gap de transfert de charge autour de $\omega = 1$ qui ne tombe pas tout à fait à zéro. Cela vient notamment du fait que la valeur de ϵ_p est grande et que le gap commence à disparaître. Ensuite en remontant à gauche, on observe à peu près trois oscillations. Étant donné que ces vaguelettes se retrouvent pour toutes les courbes du côté sur dopé et que leurs positions ne bougent pas beaucoup avec le potentiel chimique, je ne peux pas conclure s'il s'agit d'une erreur systématique du prolongement analytique ou bien d'un phénomène physique. Cependant, il est inhabituel de trouver de telles vaguelettes dans la décroissance vers un gap sur la densité d'états.

Ensuite, de l'autre côté de l'hystérèse, on observe un pseudogap. En effet, à l'endroit où on attend une décroissance du poids spectral avant de tomber dans le gap de transfert de charge et un peu au-dessus de $\omega = 0$, on observe un premier gap (le pseudogap), un pic et enfin le gap de transfert de charge. Le pseudogap semble donc apparaître subitement lorsque l'on passe l'hystérèse. En effet, même si les vaguelettes étaient des précurseurs de ce régime, le pseudogap est beaucoup plus marqué une fois l'hystérèse passée. Ensuite, à mesure que le potentiel chimique augmente dans la phase pseudogap, le gap devient de plus en plus profond pour finalement fusionner avec le gap de transfert de charge.

26. Que je reproduis en simplifiant dans le deuxième graphe de la figure 4.7

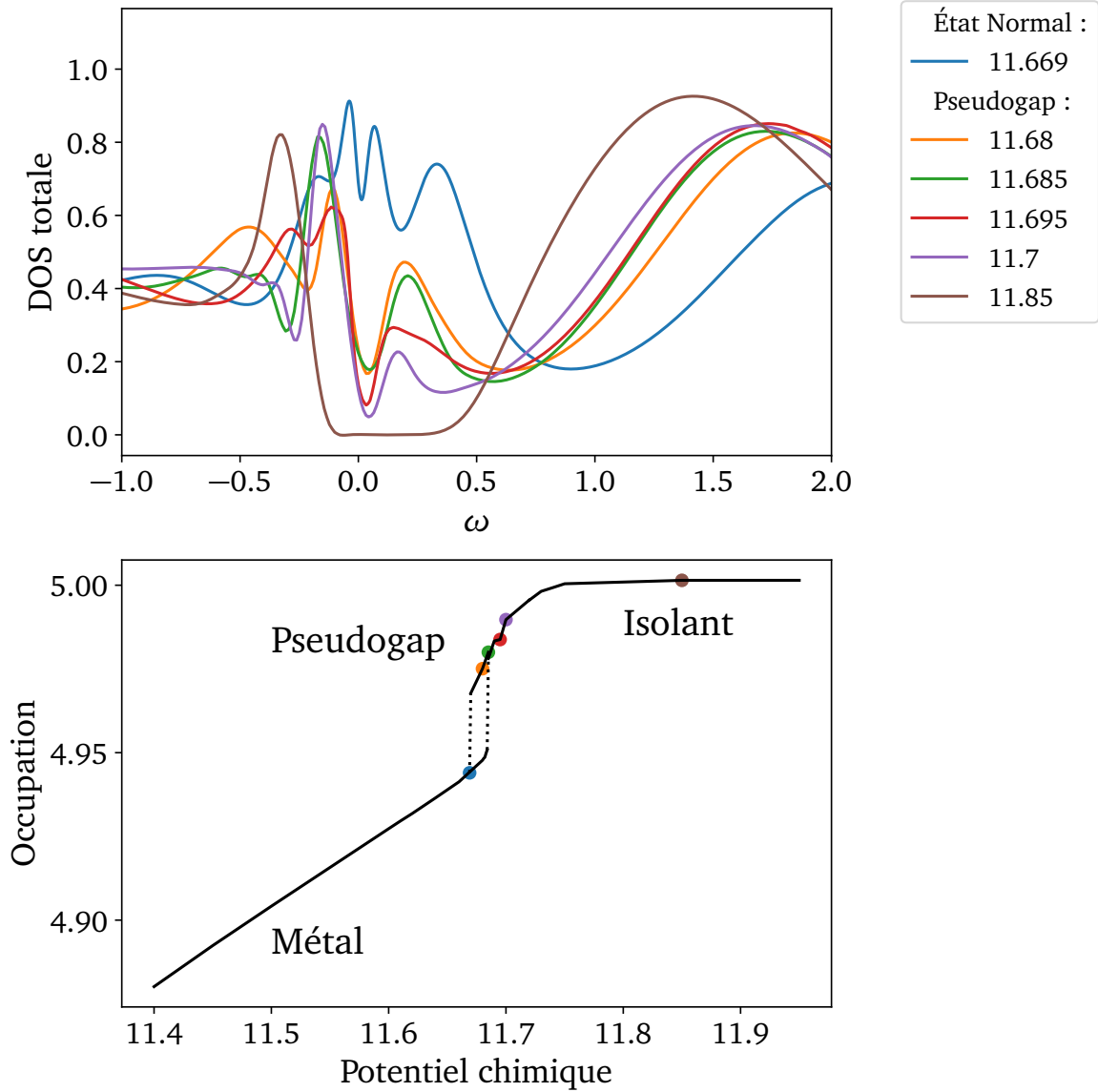


FIGURE 4.7 – Densité d'états totale dans l'état normal aux alentours du niveau de Fermi ($\omega = 0$) pour plusieurs valeurs de μ indiquées en légende au point de départ (1.4). Je trace en dessous l'occupation en fonction du potentiel chimique (μ) comme sur la Figure 3.17 dans l'état normal en noir. Je mets un point de couleur pour montrer la position par rapport à l'hystérèse des courbes de densité d'états.

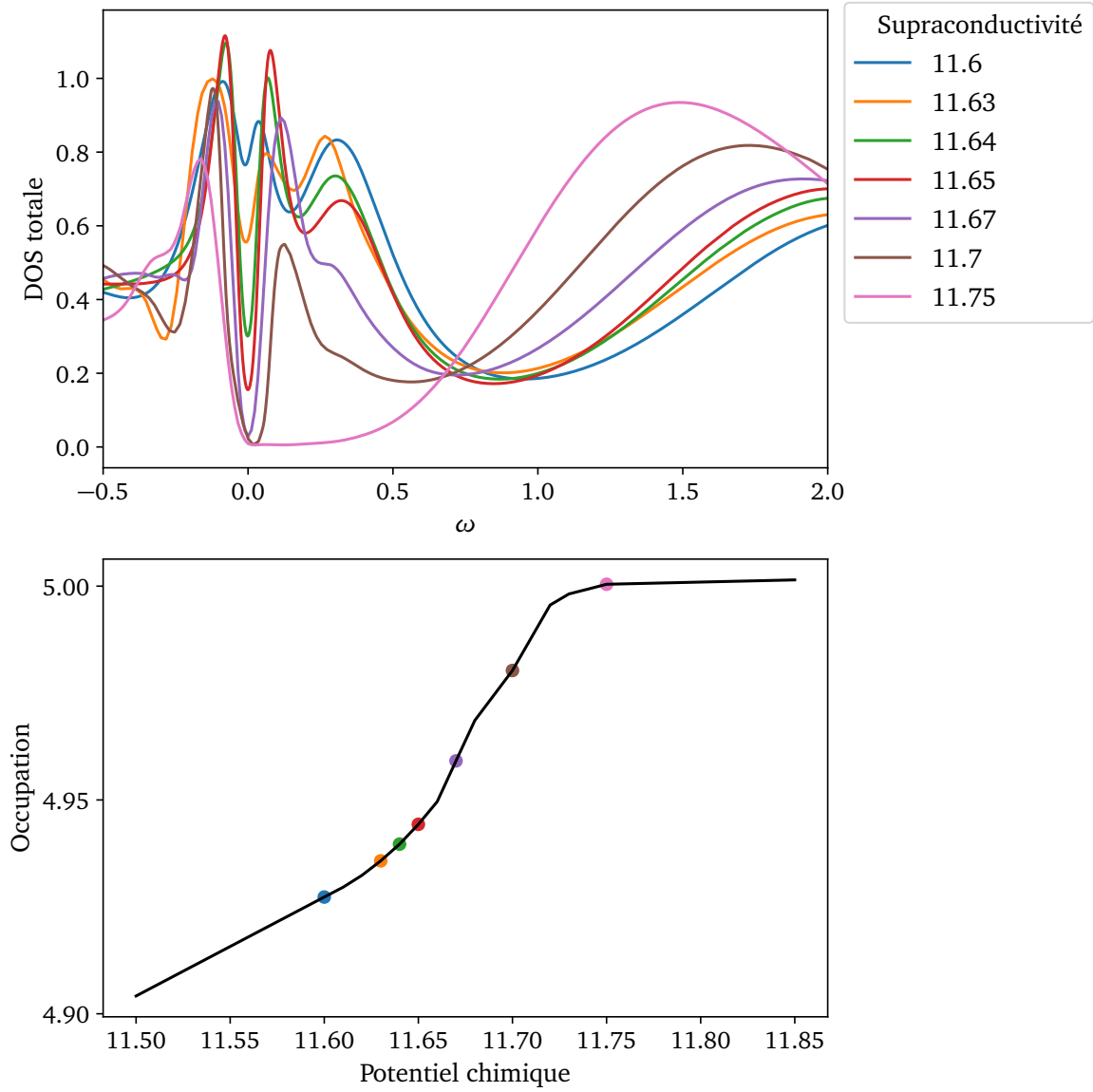


FIGURE 4.8 – Densité d'états totale dans l'état supraconducteur aux alentours du niveau de Fermi ($\omega = 0$) pour plusieurs valeurs de μ indiquées en légende au point de départ (1.4). Les conventions de tracé sont les mêmes que dans la figure précédente.

État supraconducteur En tenant compte de la possibilité d'une phase supraconductrice (voir la figure 4.8), on observe un changement de comportement. Tout se passe d'abord comme dans l'état normal à $\mu = 11.6$, valeur pour laquelle le paramètre d'ordre est nul, le dôme supraconducteur n'ayant pas commencé. Puis en entrant dans le dôme - c'est-à-dire en augmentant le potentiel chimique, on voit l'apparition du gap supraconducteur à $\omega = 0$. Ce gap ne tombe pas exactement à zéro pour les premières valeurs de μ , mais se creuse assez rapidement à mesure que le dopage diminue pour atteindre un gap dur proche du dopage optimal. Dans la même direction, le gap a tendance à devenir asymétrique, le poids spectral du côté droit

du gap ayant du mal à remonter pour de faibles valeurs du dopage. Finalement, le gap supraconducteur fusionne avec le gap de transfert de charge, qui d'ailleurs tombe à zéro à ce moment-là. Le comportement étant uniforme dans toute la phase supraconductrice, on ne semble pas observer d'entrée dans une phase de pseudogap. Cela peut être dû au fait qu'il est caché par le gap supraconducteur ou bien qu'il n'existe pas du tout. L'affaïssement du pic à droite du gap supraconducteur²⁷ pourrait cependant être assimilé à la persistance de ce pseudogap dans l'état supraconducteur.

État supraconducteur dans le régime d'hystérèse Enfin, je m'intéresse plus spécifiquement au régime d'hystérèse, dans lequel la relation entre l'occupation et le potentiel chimique ressemble fortement au régime pseudogap dans l'état normal. Cependant, le pseudogap risque d'être plus difficilement observable, à cause du gap supraconducteur. Je trace, encore une fois de la même façon, la région proche de $\omega = 0$ pour $\epsilon_p = 9.25$ sur la figure 4.9.

De la même façon qu'auparavant, lorsque le dôme supraconducteur apparaît - cette fois à $\mu = 12.017$, j'observe un gap supraconducteur dont le centre n'atteint pas le poids spectral nul. Ensuite, après le passage de la discontinuité, le paramètre d'ordre est encore non nul pour les premiers points - à 11.96 et 11.97. Le paramètre d'ordre disparaît après ça. Sur la densité d'états, pour $\mu = 11.96$ on observe un premier gap complet, qui descend jusqu'à zéro, un pic puis le gap de transfert de charge qui ne descend pas complètement à zéro. Ce comportement disparaît ensuite rapidement avec une augmentation de μ . Cela est sûrement dû à la proximité du gap de transfert de charge et au fait que ce gap n'atteint pas la valeur 0 tant que le système n'est pas dans le régime isolant. Le gap supraconducteur et le pseudogap fusionnent pour de grandes valeurs de μ comme dans la phase normale décrite au-dessus.

Je remarque que le vidage du gap supraconducteur à mesure que l'occupation augmente était déjà visible dans la phase supraconductrice. La différence ici est que la discontinuité semble créer une distinction claire entre un gap mou en dessous et un gap dur au-dessus. Je n'observe a priori pas de pseudogap ici même s'il est peut-être combiné dans la phase supraconductrice ou bien que son effet est justement de transformer le gap mou en gap dur. Comme je l'ai mentionné auparavant, un gap mou est souvent lié à l'annulation de la densité d'états selon certaines directions \mathbf{k} seulement. Je n'ai pas plus d'informations ici, mais les deux phases supraconductrice et pseudogap creusent peut-être ce gap chacune à leur façon et la coopération des deux donne ce gap dur près du demi-remplissage.

Le remplissage partiel du gap supraconducteur quand le dopage en trous augmente est en réalité observé expérimentalement dans les cuprates. En effet, déjà en augmentant la température proche de T_C , le gap ne se ferme pas, comme il le fait dans des supraconducteurs conventionnels, il semble garder la même largeur. À la place, il se remplit, c'est-à-dire que la densité d'états au milieu du gap augmente avec la température [70]. Une étude très récente²⁸ montre que le gap se remplit également à mesure que le dopage augmente. Cela pourrait expliquer les résultats visibles ici.

27. Aux alentours de $\omega = 0.2$

28. La présentation de Willem Tromp à l'APS March Meeting 2021 dans la session J47

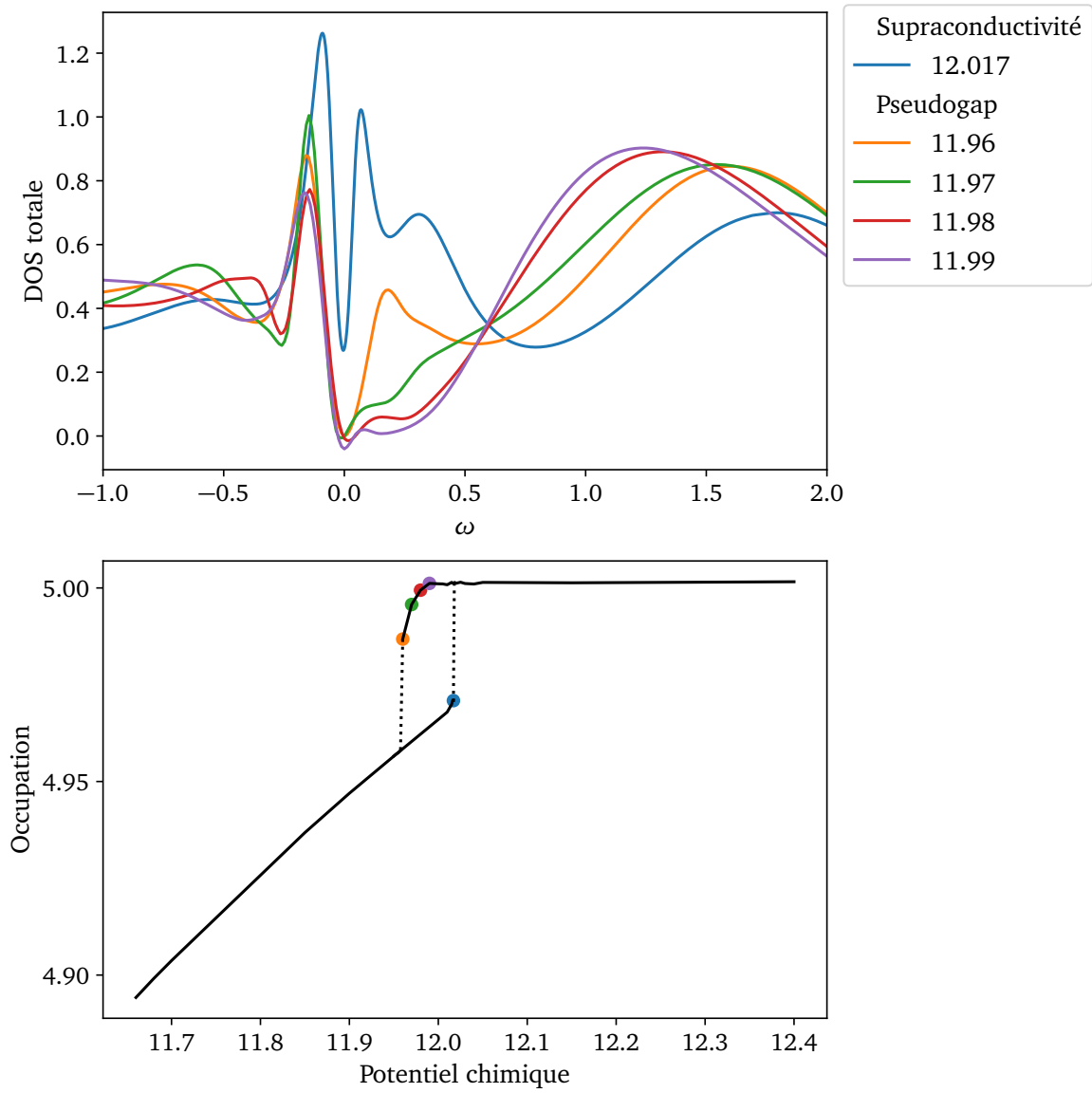


FIGURE 4.9 – Densité d'états totale dans l'état supraconducteur dans le régime d'hysté-
 rèse aux alentours du niveau de Fermi ($\omega = 0$) pour plusieurs valeurs de μ indiquées en
 légende à $\epsilon_p = 9.25$. Les conventions de tracé sont les mêmes que dans les deux figures
 précédentes.

Bibliographie

- [1] Guo-qing ZHENG, Yoshio KITAOKA, Kenji ISHIDA et Kunisuke ASAYAMA. « Local Hole Distribution in the CuO₂ Plane of High- T_c Cu-Oxides Studied by Cu and Oxygen NQR/NMR ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* 64.7 (1995). Publisher : The Physical Society of Japan, p. 2524-2532. ISSN : 0031-9015. DOI : [10.1143/JPSJ.64.2524](https://doi.org/10.1143/JPSJ.64.2524).
- [2] Damian RYBICKI et al. « Perspective on the phase diagram of cuprate high-temperature superconductors ». en. In : *Nature Communications* 7 (2016), p. 11413. ISSN : 2041-1723. DOI : [10.1038/ncomms11413](https://doi.org/10.1038/ncomms11413).
- [3] Wei RUAN et al. « Relationship between the parent charge transfer gap and maximum transition temperature in cuprates ». en. In : *Science Bulletin* 61.23 (2016), p. 1826-1832. ISSN : 20959273. DOI : [10.1007/s11434-016-1204-x](https://doi.org/10.1007/s11434-016-1204-x).
- [4] Dirk van DELFT et Peter KES. « The discovery of superconductivity ». In : *Physics Today* 63.9 (2010). Publisher : American Institute of Physics, p. 38-43. ISSN : 0031-9228. DOI : [10.1063/1.3490499](https://doi.org/10.1063/1.3490499).
- [5] W. MEISSNER et R. OCHSENFELD. « Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit ». de. In : *Naturwissenschaften* 21.44 (1933), p. 787-788. ISSN : 1432-1904. DOI : [10.1007/BF01504252](https://doi.org/10.1007/BF01504252).
- [6] F. LONDON, H. LONDON et Frederick Alexander LINDEMANN. « The electromagnetic equations of the supraconductor ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences* 149.866 (1935). Publisher : Royal Society, p. 71-88. DOI : [10.1098/rspa.1935.0048](https://doi.org/10.1098/rspa.1935.0048).
- [7] V. L. GINZBURG et L. D. LANDAU. « On the Theory of Superconductivity ». en. In : *On Superconductivity and Superfluidity : A Scientific Autobiography*. Sous la dir. de Vitaly L. GINZBURG. Berlin, Heidelberg : Springer, 2009, p. 113-137. ISBN : 978-3-540-68008-6. DOI : [10.1007/978-3-540-68008-6_4](https://doi.org/10.1007/978-3-540-68008-6_4).
- [8] J. BARDEEN, L. N. COOPER et J. R. SCHRIEFFER. « Theory of Superconductivity ». In : *Physical Review* 108.5 (1957). Publisher : American Physical Society, p. 1175-1204. DOI : [10.1103/PhysRev.108.1175](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175).
- [9] J. G. BEDNORZ et K. A. MÜLLER. « Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system ». en. In : *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter* 64.2 (1986), p. 189-193. ISSN : 1431-584X. DOI : [10.1007/BF01303701](https://doi.org/10.1007/BF01303701).
- [10] A. SCHILLING, M. CANTONI, J. D. GUO et H. R. OTT. « Superconductivity above 130 K in the Hg-Ba-Ca-Cu-O system ». en. In : *Nature* 363.6424 (1993). Number : 6424 Publisher : Nature Publishing Group, p. 56-58. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/363056a0](https://doi.org/10.1038/363056a0).

- [11] Elliot SNIDER et al. « Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride ». en. In : *Nature* 586.7829 (2020). Number : 7829 Publisher : Nature Publishing Group, p. 373-377. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/s41586-020-2801-z](https://doi.org/10.1038/s41586-020-2801-z).
- [12] J. HUBBARD et Brian Hilton FLOWERS. « Electron correlations in narrow energy bands ». In : *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* 276.1365 (1963). Publisher : Royal Society, p. 238-257. DOI : [10.1098/rspa.1963.0204](https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204).
- [13] Antoine GEORGES, Gabriel KOTLIAR, Werner KRAUTH et Marcelo J. ROZENBERG. « Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions ». In : *Reviews of Modern Physics* 68.1 (1996). Publisher : American Physical Society, p. 13-125. DOI : [10.1103/RevModPhys.68.13](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.68.13).
- [14] V. J. EMERY et G. REITER. « Mechanism for high-temperature superconductivity ». In : *Physical Review B* 38.7 (1988), p. 4547-4556. DOI : [10.1103/PhysRevB.38.4547](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.4547).
- [15] N. KOWALSKI, S. S. DASH, D. SÉNÉCHAL et A.-M. S. TREMBLAY. *Oxygen hole content, charge-transfer gap, covalency, and cuprate superconductivity*. arXiv : 2104.07087. 2021. URL : <http://arxiv.org/abs/2104.07087>.
- [16] E. GULL et A. J. MILLIS. « Numerical models come of age ». en. In : *Nature Physics* 11.10 (2015). Number : 10 Publisher : Nature Publishing Group, p. 808-810. ISSN : 1745-2481. DOI : [10.1038/nphys3501](https://doi.org/10.1038/nphys3501).
- [17] Eva PAVARINI et Institute for ADVANCED SIMULATION, éd. *Emergent phenomena in correlated matter : lecture notes of the Autumn School Correlated Electrons 2013 at Forschungszentrum Jülich, 23 – 27 September 2013*. en. Schriften des Forschungszentrums Jülich Reihe Modeling and Simulation 3. Meeting Name : Autumn School Correlated Electrons OCLC : 862816584. Jülich : Forschungszentrum Jülich, 2013. ISBN : 978-3-89336-884-6. URL : <https://www.cond-mat.de/events/%20correl13/manuscripts/pavarini.pdf>.
- [18] Cédric WEBER, Chuck-Hou YEE, Kristjan HAULE et Gabriel KOTLIAR. « Scaling of the transition temperature of hole-doped cuprate superconductors with the charge-transfer energy ». en. In : *EPL (Europhysics Letters)* 100.3 (2012). arXiv : 1108.3028, p. 37001. ISSN : 0295-5075, 1286-4854. DOI : [10.1209/0295-5075/100/37001](https://doi.org/10.1209/0295-5075/100/37001).
- [19] L. FRATINO, P. SÉMON, G. SORDI et A.-M. S. TREMBLAY. « Pseudogap and superconductivity in two-dimensional doped charge-transfer insulators ». In : *Physical Review B* 93.24 (2016), p. 245147. DOI : [10.1103/PhysRevB.93.245147](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.245147).
- [20] O. K. ANDERSEN, A. I. LIECHTENSTEIN, O. JEPSEN et F. PAULSEN. « LDA energy bands, low-energy hamiltonians, t' , t'' , t_{\perp} (k), and J_{\perp} ». In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. Proceedings of the Conference on Spectroscopies in Novel Superconductors 56.12 (1995), p. 1573-1591. ISSN : 0022-3697. DOI : [10.1016/0022-3697\(95\)00269-3](https://doi.org/10.1016/0022-3697(95)00269-3).
- [21] A. K. MCMAHAN, Richard M. MARTIN et S. SATPATHY. « Calculated effective Hamiltonian for La_2CuO_4 and solution in the impurity Anderson approximation ». In : *Physical Review B* 38.10 (1988). Publisher : American Physical Society, p. 6650-6666. DOI : [10.1103/PhysRevB.38.6650](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.6650).

- [22] Peizhi MAI, Giovanni BALDUZZI, Steven JOHNSTON et Thomas A. MAIER. « Orbital structure of the effective pairing interaction in the high-temperature superconducting cuprates ». en. In : *npj Quantum Materials* 6.1 (2021), p. 1-5. ISSN : 2397-4648. DOI : [10.1038/s41535-021-00326-5](https://doi.org/10.1038/s41535-021-00326-5).
- [23] Sidhartha Shankar DASH et David SÉNÉCHAL. « Pseudogap transition within the superconducting phase in the three-band Hubbard model ». In : *Physical Review B* 100.21 (2019). arXiv : 1910.03522, p. 214509. ISSN : 2469-9950, 2469-9969. DOI : [10.1103/PhysRevB.100.214509](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.214509).
- [24] Adolfo AVELLA, Ferdinando MANCINI, Francesco Paolo MANCINI et Evgeny PLEKHANOV. « Emery vs. Hubbard model for cuprate superconductors : a composite operator method study ». en. In : *The European Physical Journal B* 86.6 (2013), p. 265. ISSN : 1434-6036. DOI : [10.1140/epjb/e2013-40115-3](https://doi.org/10.1140/epjb/e2013-40115-3).
- [25] Dieter VOLLHARDT, Krzysztof BYCZUK et Marcus KOLLAR. « Dynamical Mean-Field Theory ». en. In : *Strongly Correlated Systems : Theoretical Methods*. Sous la dir. d'Adolfo AVELLA et Ferdinando MANCINI. Springer Series in Solid-State Sciences. Berlin, Heidelberg : Springer, 2012, p. 203-236. ISBN : 978-3-642-21831-6. DOI : [10.1007/978-3-642-21831-6_7](https://doi.org/10.1007/978-3-642-21831-6_7).
- [26] P. W. ANDERSON. « Localized Magnetic States in Metals ». In : *Physical Review* 124.1 (1961), p. 41-53. DOI : [10.1103/PhysRev.124.41](https://doi.org/10.1103/PhysRev.124.41).
- [27] Patrick SÉMON. « Continuous-Time Quantum Monte Carlo Impurity Solvers : Improvements and Applications ». en. Accepted : 2014-05-16T18 :47 :32Z Publisher : Université de Sherbrooke. Thèse de doct. Université de Sherbrooke, 2014. URL : <https://savoirs.usherbrooke.ca/handle/11143/5289>.
- [28] Emanuel GULL et al. « Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models ». In : *Reviews of Modern Physics* 83.2 (2011). arXiv : 1012.4474, p. 349-404. ISSN : 0034-6861, 1539-0756. DOI : [10.1103/RevModPhys.83.349](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.83.349).
- [29] W. K. HASTINGS. « Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications ». en. In : *Biometrika* 57.1 (1970), p. 97-109. ISSN : 0006-3444. DOI : [10.1093/biomet/57.1.97](https://doi.org/10.1093/biomet/57.1.97).
- [30] D. J. SCALAPINO. « The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors ». In : *Physics Reports* 250.6 (1995), p. 329-365. ISSN : 0370-1573. DOI : [10.1016/0370-1573\(94\)00086-1](https://doi.org/10.1016/0370-1573(94)00086-1).
- [31] Thomas MAIER, Mark JARRELL, Thomas PRUSCHKE et Matthias H. HETTLER. « Quantum cluster theories ». In : *Reviews of Modern Physics* 77.3 (2005). Publisher : American Physical Society, p. 1027-1080. DOI : [10.1103/RevModPhys.77.1027](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.77.1027).
- [32] Kristjan HAULE. « Quantum Monte Carlo impurity solver for cluster dynamical mean-field theory and electronic structure calculations with adjustable cluster base ». In : *Physical Review B* 75.15 (2007). Publisher : American Physical Society, p. 155113. DOI : [10.1103/PhysRevB.75.155113](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.155113).
- [33] Jack SHERMAN et Winifred J. MORRISON. « Adjustment of an Inverse Matrix Corresponding to a Change in One Element of a Given Matrix ». EN. In : *Annals of Mathematical Statistics* 21.1 (1950). Publisher : Institute of Mathematical Statistics, p. 124-127. ISSN : 0003-4851, 2168-8990. DOI : [10.1214/aoms/1177729893](https://doi.org/10.1214/aoms/1177729893).

- [34] N. AUVRAY et al. « Nematic fluctuations in the cuprate superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ». en. In : *Nature Communications* 10.1 (2019), p. 5209. ISSN : 2041-1723. DOI : [10.1038/s41467-019-12940-w](https://doi.org/10.1038/s41467-019-12940-w).
- [35] Michal ZEGRODNIK, Andrzej BIBORSKI et Jozef SPALEK. « Superconductivity and intra-unit-cell electronic nematic phase in the three-band model of cuprates ». en. In : *The European Physical Journal B* 93.9 (2020), p. 183. ISSN : 1434-6036. DOI : [10.1140/epjb/e2020-10290-3](https://doi.org/10.1140/epjb/e2020-10290-3).
- [36] H. Kamerlingh ONNES. nl. In : *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden. Suppl.*, vol. 29 (1911).
- [37] L. LANDAU. « The Theory of Phase Transitions ». en. In : *Nature* 138.3498 (1936). Number : 3498 Publisher : Nature Publishing Group, p. 840-841. ISSN : 1476-4687. DOI : [10.1038/138840a0](https://doi.org/10.1038/138840a0).
- [38] N. P. ARMITAGE, P. FOURNIER et R. L. GREENE. « Progress and perspectives on electron-doped cuprates ». In : *Reviews of Modern Physics* 82.3 (2010). Publisher : American Physical Society, p. 2421-2487. DOI : [10.1103/RevModPhys.82.2421](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.2421).
- [39] J. M. TRANQUADA, S. M. HEALD et A. R. MOODENBAUGH. « X-ray-absorption near-edge-structure study of $\text{La}_{2-x}(\text{Ba}, \text{Sr})_x\text{CuO}_{4-y}$ superconductors ». In : *Physical Review B* 36.10 (1987). Publisher : American Physical Society, p. 5263-5274. DOI : [10.1103/PhysRevB.36.5263](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.36.5263).
- [40] C. T. CHEN et al. « Electronic states in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ probed by soft-x-ray absorption ». en. In : *Physical Review Letters* 66.1 (1991), p. 104-107. ISSN : 0031-9007. DOI : [10.1103/PhysRevLett.66.104](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.66.104).
- [41] N. GAUQUELIN et al. « Atomic scale real-space mapping of holes in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ ». en. In : *Nature Communications* 5 (2014). DOI : [10.1038/ncomms5275](https://doi.org/10.1038/ncomms5275).
- [42] J. ZAAENEN, G. A. SAWATZKY et J. W. ALLEN. « Band gaps and electronic structure of transition-metal compounds ». In : *Physical Review Letters* 55.4 (1985). Publisher : American Physical Society, p. 418-421. DOI : [10.1103/PhysRevLett.55.418](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.418).
- [43] R. N. SILVER, D. S. SIVIA et J. E. GUBERNATIS. « Maximum-entropy method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data ». In : *Physical Review B* 41.4 (1990). Publisher : American Physical Society, p. 2380-2389. DOI : [10.1103/PhysRevB.41.2380](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.2380).
- [44] A. V FERRIS-PRABHU et D. H WITHERS. « Numerical analytic continuation using Padé approximants ». en. In : *Journal of Computational Physics* 13.1 (1973), p. 94-99. ISSN : 0021-9991. DOI : [10.1016/0021-9991\(73\)90127-7](https://doi.org/10.1016/0021-9991(73)90127-7).
- [45] Anders W. SANDVIK. « Stochastic method for analytic continuation of quantum Monte Carlo data ». In : *Physical Review B* 57.17 (1998). Publisher : American Physical Society, p. 10287-10290. DOI : [10.1103/PhysRevB.57.10287](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.10287).
- [46] Dominic BERGERON et A.-M. S. TREMBLAY. « Algorithms for optimized maximum entropy and diagnostic tools for analytic continuation ». In : *Phys. Rev. E* 94 (2 2016), p. 023303. DOI : [10.1103/PhysRevE.94.023303](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.94.023303).
- [47] Michael JURKUTAT, Andreas ERB et Jürgen HAASE. « T_c and Other Cuprate Properties in Relation to Planar Charges as Measured by NMR ». en. In : *Condensed Matter* 4.3 (2019), p. 67. ISSN : 2410-3896. DOI : [10.3390/condmat4030067](https://doi.org/10.3390/condmat4030067).

- [48] J. M. KOSTERLITZ et D. J. THOULESS. « Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems ». en. In : *Journal of Physics C : Solid State Physics* 6.7 (1973). Publisher : IOP Publishing, p. 1181-1203. ISSN : 0022-3719. DOI : [10.1088/0022-3719/6/7/010](https://doi.org/10.1088/0022-3719/6/7/010).
- [49] Olivier SIMARD. « Rigidité superfluide et température critique en présence d'une autre phase ». fr. Mém. de mast. Université de Sherbrooke, 2019. DOI : <http://hdl.handle.net/11143/15039>.
- [50] P. M. CHAIKIN et T. C. LUBENSKY. *Principles of Condensed Matter Physics*. Cambridge : Cambridge University Press, 1995. ISBN : 978-0-521-79450-3. DOI : [10.1017/CBO9780511813467](https://doi.org/10.1017/CBO9780511813467).
- [51] Michael JURKUTAT et al. « Distribution of electrons and holes in cuprate superconductors as determined from ^{17}O and ^{63}Cu nuclear magnetic resonance ». In : *Physical Review B* 90.14 (2014). Publisher : American Physical Society, p. 140504. DOI : [10.1103/PhysRevB.90.140504](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.140504).
- [52] G. SORDI, K. HAULE et A.-M. S. TREMBLAY. « Mott physics and first-order transition between two metals in the normal-state phase diagram of the two-dimensional Hubbard model ». In : *Physical Review B* 84.7 (2011). Publisher : American Physical Society, p. 075161. DOI : [10.1103/PhysRevB.84.075161](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.075161).
- [53] B. LORET et al. « Vertical temperature boundary of the pseudogap under the superconducting dome in the phase diagram of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ». In : *Physical Review B* 96.9 (2017). Publisher : American Physical Society, p. 094525. DOI : [10.1103/PhysRevB.96.094525](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.094525).
- [54] David SÉNÉCHAL, P.-L. LAVERTU, M.-A. MAROIS et A.-M. S. TREMBLAY. « Competition between Antiferromagnetism and Superconductivity in High- T_c Cuprates ». In : *Physical Review Letters* 94.15 (2005). Publisher : American Physical Society, p. 156404. DOI : [10.1103/PhysRevLett.94.156404](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.156404).
- [55] Patrick A. LEE, Naoto NAGAOSA et Xiao-Gang WEN. « Doping a Mott insulator : Physics of high-temperature superconductivity ». In : *Reviews of Modern Physics* 78.1 (2006). Publisher : American Physical Society, p. 17-85. DOI : [10.1103/RevModPhys.78.17](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.78.17).
- [56] P. W. ANDERSON. « The Resonating Valence Bond State in La_2CuO_4 and Superconductivity ». en. In : *Science* 235.4793 (1987). Publisher : American Association for the Advancement of Science Section : Reports, p. 1196-1198. ISSN : 0036-8075, 1095-9203. DOI : [10.1126/science.235.4793.1196](https://doi.org/10.1126/science.235.4793.1196).
- [57] N. E. BICKERS, D. J. SCALAPINO et S. R. WHITE. « Conserving Approximations for Strongly Correlated Electron Systems : Bethe-Salpeter Equation and Dynamics for the Two-Dimensional Hubbard Model ». In : *Physical Review Letters* 62.8 (1989). Publisher : American Physical Society, p. 961-964. DOI : [10.1103/PhysRevLett.62.961](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.62.961).
- [58] Tôru MORIYA et Yoshinori TAKAHASHI. « Anomalous Optical Conductivity in the Normal State of High T_c Oxides ». In : *Journal of the Physical Society of Japan* 60.3 (1991). Publisher : The Physical Society of Japan, p. 776-779. ISSN : 0031-9015. DOI : [10.1143/JPSJ.60.776](https://doi.org/10.1143/JPSJ.60.776).

- [59] O. GINGRAS, R. NOURAFKAN, A.-M. S. TREMBLAY et M. CÔTÉ. « Superconducting Symmetries of Sr_2RuO_4 from First-Principles Electronic Structure ». In : *Physical Review Letters* 123.21 (2019). Publisher : American Physical Society, p. 217005. DOI : [10.1103/PhysRevLett.123.217005](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.123.217005).
- [60] Armin COMANAC, Luca de'MEDICI, Massimo CAPONE et A. J. MILLIS. « Optical conductivity and the correlation strength of high-temperature copper-oxide superconductors ». en. In : *Nature Physics* 4.4 (2008). Number : 4 Publisher : Nature Publishing Group, p. 287-290. ISSN : 1745-2481. DOI : [10.1038/nphys883](https://doi.org/10.1038/nphys883).
- [61] Xin WANG et al. « Antiferromagnetism and the gap of a Mott insulator : Results from analytic continuation of the self-energy ». In : *Physical Review B* 80.4 (2009). Publisher : American Physical Society, p. 045101. DOI : [10.1103/PhysRevB.80.045101](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.045101).
- [62] Zhi-Hao CUI et al. « Ground-state phase diagram of the three-band Hubbard model from density matrix embedding theory ». In : *Physical Review Research* 2.4 (2020). Publisher : American Physical Society, p. 043259. DOI : [10.1103/PhysRevResearch.2.043259](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.043259).
- [63] Vinay AMBEGAOKAR et Matthias TROYER. « Estimating errors reliably in Monte Carlo simulations of the Ehrenfest model ». en. In : *American Journal of Physics* 78.2 (2010). Publisher : American Association of Physics TeachersAAPT, p. 150. ISSN : 0002-9505. DOI : [10.1119/1.3247985](https://doi.org/10.1119/1.3247985).
- [64] Douglas R. HOFSTADTER. « Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields ». In : *Physical Review B* 14.6 (1976). Publisher : American Physical Society, p. 2239-2249. DOI : [10.1103/PhysRevB.14.2239](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.2239).
- [65] S. VERRET et al. « Intrinsic cluster-shaped density waves in cellular dynamical mean-field theory ». In : *Physical Review B* 100.22 (2019). Publisher : American Physical Society, p. 224520. DOI : [10.1103/PhysRevB.100.224520](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.224520).
- [66] Jan M. TOMCZAK et Silke BIERMANN. « Optical properties of correlated materials : Generalized Peierls approach and its application to VO_2 ». In : *Physical Review B* 80.8 (2009), p. 085117. DOI : [10.1103/PhysRevB.80.085117](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.085117).
- [67] Tom TIMUSK et Bryan STATT. « The pseudogap in high-temperature superconductors : an experimental survey ». en. In : *Reports on Progress in Physics* 62.1 (1999). Publisher : IOP Publishing, p. 61-122. ISSN : 0034-4885. DOI : [10.1088/0034-4885/62/1/002](https://doi.org/10.1088/0034-4885/62/1/002).
- [68] C. M. VARMA. « Theory of the pseudogap state of the cuprates ». In : *Physical Review B* 73.15 (2006). Publisher : American Physical Society, p. 155113. DOI : [10.1103/PhysRevB.73.155113](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.155113).
- [69] Kai-Yu YANG, T. M. RICE et Fu-Chun ZHANG. « Phenomenological theory of the pseudogap state ». In : *Physical Review B* 73.17 (2006). Publisher : American Physical Society, p. 174501. DOI : [10.1103/PhysRevB.73.174501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.174501).
- [70] Øystein FISCHER et al. « Scanning tunneling spectroscopy of high-temperature superconductors ». In : *Reviews of Modern Physics* 79.1 (2007). Publisher : American Physical Society, p. 353-419. DOI : [10.1103/RevModPhys.79.353](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.79.353).